

05(К.УН.)
Вісн



ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО
УНІВЕРСИТЕТУ**

**Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ
НАУКИ**

ВИПУСК №2

Київ - 2006

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

Серія: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК № 2 2006

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича

КНУ

ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12906JB

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 Антонівич**, 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

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Бабич В.М., Головащук Н.С. Геометричні методи в теорії зображень	9
Бондаренко Є.В. Дії груп ітерованих монодромій гіперболічних квадратичних многочленів на кореневому дереві	15
Бондаренко Н.В. Алгебри Лі асоційовані з силовськими p -підгрупами деяких класичних лінійних груп	21
Масол В.І., Поперешняк С.В. Про швидкість зближення розподілу рангу випадкової розрідженої булевої матриці до розподілу Пуассона	28
Савочкіна Т.І. Класифікація 3-породжених p -груп, у яких нормалізатори підгруп нормальні та мають доповнення ($p > 2$)	42
Семенюта М.Ф. 1-факторизації булевих кубів	50
Стронська Г.О. Напівгрупа стискуючих перетворень булеану скінченної множини	57

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Горошко О.О., Кір'янов Д.В. Стійкість та коливання антенної щогли під дією вітрових навантажень	65
Данілов В.Я., Іщук В.В., Кравець В.І., Могильова В.В. Умови асимптотичної еквівалентності лінійних систем різницевих рівнянь	70
Іваненко Д.О., Юрачківський А.П. Мартингальні методи оцінювання в моделі нелінійної авторегресії	75
Киричок І.Ф., П'ятецька О.В., Карнаухов М.В. Згинні коливання та дисипативний розігрів кільцевої в'язкопружної пластинки з п'єзоелектричними акuatorами при електромеханічному моногармонічному навантаженні	84
Ковтун О.І., Перегуда О.В. Модифікований проєкційно-ітеративний метод розв'язування лінійних інтегральних рівнянь з додатковими умовами	93
Губа А.О., Гуржій О.А., Мелешко В.В. Рівномірно-обертові конфігурації точкових вихрів	100
Сенченков І.К., Андрушко Н.Ф. Моделювання зв'язаних термомеханічних процесів у складеному стержні Гопкінсона	109

при імпульсному навантаженні	
Юрачківський А.П. Простий спосіб наближеного розв'язування рівнянь Вольтерра з виродженим ядром	119

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Буй Д.Б., Кахута Н.Д. Властивості відношення конфінальності на устрій множини часткових функцій	125
Верченко А.П., Швець О.Ф. Структурно-параметричний підхід в задачах виділення затінених ділянок на аерознімках	136
Власюк А.П., Степанченко О.М. Чисельне розв'язування однієї нелінійної задачі розчинення пласта солі	142
Волощук В.М., Семенов В.В. Узагальнений розв'язок однієї задачі зі структурної акустики	151
Грицай І.В. Оцінки стійкості стану рівноваги системи Лотки -Вольтерра з запізненням на площині	159
Діблік Й., Хусаїнов Т.Д., Хусаїнов Д.Я. Побудова загального розв'язку лінійних однорідних систем зі слабким запізненням	166
Слейко Т.Я. Апроксимація оптимальної політики по зміні структури капіталу при досягненні компанією граничної межі продаж	175
Завадський І.О., Дерев'янченко О.В. До питання про часову оптимізацію паралельних програм	181
Зінько П.М. Неявна різницева схема для розв'язування неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами	186
Кудін Г.І. Керування лінійними дискретними системами при фазових обмеженнях	192
Лукович О.В. Про ергодичний розподіл пуасонівського процесу на відрізьку	198
Майко Н.В., Рябічев В.Л. Реалізація паралельного методу довільного порядку точності для еволюційного рівняння зі змінним оператором	204
Маляр М.М. Методи групування критеріїв ефективності для задач вибору	211
Мащенко С.О. Слабкі індивідуально-оптимальні рівноваги	216
Меркур'єв М. Г. Про один підхід до визначення інтегралу за процесом нечіткого блукання	224
Омельчук Л.Л. Система автоматизації доведення теорем теорії мета номінативних даних	231
Сопронюк Є.Ф. Параметрична оптимізація в системах зі зміною	236

вимірності фазового простору	
Хлобистов В.В., Кашпур О.Ф., Малишева Т.М. Про множину операторних інтерполянтів, гранично інваріантних щодо поліномів	246
Шевченко О.В. Розробка архітектури агента-здобувача тематичної інформації	253

РАДІОФІЗИКА

Веклич А.М., Порицький П.В. Теплова контракція дуги в мідній парі	263
Висоцький В.І., Сімонов С.В. Нові можливості керування рухом атомів (молекул) та діелектричних наночастинок за допомогою інтенсивних недифрагуючих оптичних пучків	274
Григорук В.І., Понежа Г.В., Понежа С.Г. Голографічна інтерферометрія рідин при міліметровому опромінюванні	284
Добровольський В.М., Іщук Л.В., Павлюк С.П., Кисліцин В.М. Залежність теплопровідності діодного кристала від орієнтації <i>p-n</i> переходу	291
Дяченко С.А., Коваленко В.Ф., Танигін Б.М., Тичко О.В. Структура блохівських доменних меж в магнітоупорядкованому кубічному кристалі з сильними полями розмагнічування	295
Ільченко В.В., Буянін О.О., Панарін К.Ю., Третяк О.В., Шкіль М.В. Дослідження впливу шару квантових точок на вольт-фарадну залежність контакту метал-напівпровідник	302
Кононов М.В., Нетребя А.В., Нагуляк О.О. Вплив немонохроматичності випромінювання на реконструкцію томограм у проективній томографії	311
Корнієнко М., Григорук В.І., Корнієнко О., Вебла Т.С. Про природу глибоких «провалів» в інфрачервоних спектрах поглинання	317
Овечко В.С., Сальніков А.О. Нестационарні рівняння для густини ймовірності чистих квантових станів	326
Пільгун Ю.В. Вибір параметрів дискретизації оптичних сигналів при чисельному моделюванні	331
Самчук О.В., Кельник О.І. Випромінювання вістлерів модульованим електронним пучком у слабконеоднорідній плазмі	338
Скришевський В.А., Літовченко В.Г., Клюй М.І., Литвиненко С.В., Козинець О.В., Ничипорук О.І. МДН сонячний елемент із затвором з поруватого кремнію та інверсійним	346

СУЧАСНА ФІЗИКА

Байдулаєва А., Велешук В.П., Власенко О.І., Ляшенко О.В., Мозоль П.О. Визначення порогу плавлення CdTe по акустичному відгуку при лазерному імпульсному опроміненні	355
Боровий М.О., Іщенко Р.М., Степаніщев М.Б. Рентгенівські емісійні $M\alpha$ - та $M\beta$ - спектри кратноіонізованих атомів Au	361
Вінніченко М.В., Поперенко Л.В., Озеров М.В., Лебедева Т.С., Шпильовий П.Б. Оптичні властивості плівок оксиду цинку, виготовлених методом реактивного магнетронного розпилення при різних тисках залишкових газів	370
Гончарук Ю.С., Гречко Л.Г., Грищук О.Ю., Лерман Л.Б., Шостак С.В. Максвелл-Вагнерівська поляризація матричних дисперсних систем з кульовими напівпровідниковими включеннями в електричному полі	376
Губанов В.О., Білий М.М., Дмитренко О.П., Ковригін С.В., Комарова Л.О., Куліш М.П., Лізунова С.В., Покропивний В.В. Хіральна анізотропія коливальних мод вуглецевих нанотрубок та її прояв у спектрах комбінаційного розсіяння світла	385
Дмитренко О.П., Стащук В.С., Павленко О.Л., Попенко В.І. Оптична провідність твердих фулеренів C_{60} при легуванні	407
Загородній А.Г., Момот А.І., Екранування зарядженої порошинки у плазмі, модель точкового стоку	413
Захаренко М.І., Копань В.С., Копань Ю.В., Хуторянська Н.В. Вплив магнітного поля і механічних напруг на термо-е.р.с. аморфного сплаву $Fe_{75}Ni_4Mo_3Si_2B_{16}$	420
Ковальчук В.І., Комарова Л.О., Наконечний Є.П. Вплив розчинених фулеренів C_{60} на коефіцієнт самодифузії молекул бензолу	428
Копань В.С., Лень Т.А., Лозовий Ф.В., Мацуй Л.Ю. Дослідження вуглецевих нанотрубок на електронному мікроскопі	431
Корнієнко М.Є. Квантові закономірності в водних розчинах електролітів. 1. Природа розчинності речовин в воді і гідратації іонів	438
Курилюк В.В., Горб А.М., Половина О.І., Коротченков О.О. Електропружні коливання тривимірних прямокутних пластин-резонаторів $LiNbO_3$	452

Новиков М.М., Спиридонова І.М., Береза О.Ю. Роль концентраційного поля за умов евтектичної кристалізації	456
Подольн А.О., Коротченков О.О., Кондратенко С.В., Чуприна Р.Г. Вплив ультразвукової обробки на фотолюмінесценцію поруваного кремнію	464
Поперенко Л.В., Григорук В.І., Носач Д.В. Особливості деформації шару оксиду хрому на поверхні нержавіючої сталі при мікроіндентуванні	468
Рудніков Є.Г., Альохін О.Д. Розширене рівняння кривої співіснування рідин поблизу критичної точки	472
Храпатий С.В., Ковальчук В.І., Клепко В.В. Дослідження кінетики седиментації флокульованих суспензій каолініту	476
Шайкевич І.А., Мельниченко Л.Ю., Титарчук Б.Б. Вплив шорсткості поверхні на вимірювані оптичні сталі алюмінію	481

THE UNIVERSITY OF CHICAGO
DEPARTMENT OF THE HISTORY OF ARTS
AND ARCHITECTURE
1100 EAST 58TH STREET
CHICAGO, ILLINOIS 60637

OFFICE OF THE DEAN
OF THE FACULTY OF THE DIVISION OF THE PHYSICAL SCIENCES
5708 SOUTH DICKINSON AVE.
CHICAGO, ILLINOIS 60637

THE UNIVERSITY OF CHICAGO
DEPARTMENT OF THE HISTORY OF ARTS
AND ARCHITECTURE
1100 EAST 58TH STREET
CHICAGO, ILLINOIS 60637

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ЙМОВІРНОСТЕЙ

УДК 512.643, 512.583, 512.647

В'ячеслав М. Бабищ,
Наталія С. Головащук*

Геометричні методи в теорії
зображень

Серія: фізико-математичні
науки

В роботі розвивається геометрична техніка двовимірних симпліціальних комплексів, яка дає змогу досліджувати властивості категорії зображень бімодульних задач розгляданого класу.

Ключові слова: бімодульна задача, накриття, симпліціальний комплекс, просто зв'язна бімодульна задача.

Vyacheslav M. Babysh,
Nataliya S. Golovashchuk*

Geometric Methods in
Representation Theory

Series: Physics &
Mathematics Sciences

We develop geometrical technique of two-dimensional cell complexes which allows to investigate the properties of representation category of bimodule problem from some class.

Key words: bimodule problem, covering, cell complex, simply connected bimodule problem.

*E-mails: babysh@gala.net golova@univ.kiev.ua

We apply a geometrical technique of two-dimensional cell complexes to investigate the properties of representation category of bimodule problem from some class.

The proofs use geometric methods of irreducible diagrams, contracting closed walks in bigraphs. These methods are analogous to those used in the geometric group theory (Olshanskyj, Gersten, Gromov etc., see [1], [5]).

1 Basic notions

In this paper we use the notions and the notations from [2]. In this section we introduce geometrical notions, which we need in the proofs.

1.1 Standard uniserial bimodule problems

Consider the category $\mathcal{C}_2 = \mathbb{k}[[t]] \oplus \mathbb{k}[[t]]$ such that $\text{Ob } \mathcal{C}_2 = \{1, 2\}$, $\mathcal{C}_2(1, 1) = \mathbb{k}[[t]] \cdot 1_1$, $\mathcal{C}_2(2, 2) = \mathbb{k}[[t]] \cdot 1_2$, $\mathcal{C}_2(1, 2) = 0$, $\mathcal{C}_2(2, 1) = 0$.

Consider integers $n_1 > 0$, $n_2 > 0$, $n \geq 0$. The special bimodule $\mathcal{M}_{n_1, n, n_2}$ over the category $\mathcal{C}_2$ is defined as follows:

$$\mathcal{M}_{n_1, n, n_2}(i, j) = \begin{cases} \mathbb{k}v_1 \oplus \cdots \oplus \mathbb{k}v_n, & i = 1, j = 2, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

$$v_i(1_1 t) = \begin{cases} v_{i+n_1}, & \text{if } i + n_1 \leq n, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases} \quad (t 1_2)v_i = \begin{cases} v_{i+n_2}, & \text{if } i + n_2 \leq n, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

The bimodule problem $\mathcal{A}_{n_1, n, n_2} = (\mathcal{C}, \mathcal{M}_{n_1, n, n_2})$ is depicted as follows

$$\textcircled{1} \xrightarrow[n_1]{n} \xrightarrow[n_2]{} \textcircled{2}$$

The class Q of the bimodule problems: the locally finite dimensional bimodules over the categories $\mathcal{C}_n$, $n \geq 1$, of the form

$$\begin{aligned} \text{Ob } \mathcal{C}_n &= \{1, \dots, n\}, \quad \mathcal{C}_n(i, j) = 0, \quad i \neq j, \\ \mathcal{C}_n(i, i) &= k[[t]] \cdot 1_i, \quad i, j \in \text{Ob } \mathcal{C}_n. \end{aligned}$$

Consider the subclass $Q_r \subset Q$ of bimodule problems $\mathcal{A}$ such that for any $i, j \in \text{Ob } \mathcal{C}$, $i \neq j$, the subproblem $\mathcal{A}_{i, j} = \mathcal{A}_{\{i, j\}}$ over the category $\mathcal{C}_{i, j}$ with nonzero bimodule $\mathcal{M}_{i, j}$ is equivalent to $\mathcal{A}_{n_1, n, n_2}$ for some n, n_1, n_2 , where n_1 or n_2 equals 1.

1.2 Bigraph and basis of bimodule problem

Recall, that a bigraph Γ consists of a set Γ_0 of vertices, the sets of solid and dotted arrows Γ_1^0 and Γ_1^1 ($\Gamma_1^0 \cap \Gamma_1^1 = \emptyset$) and the maps $s, e : \Gamma_1^0 \cup \Gamma_1^1 \rightarrow \Gamma_0$ sending an arrow x to its starting $s(x)$ and ending $e(x)$ vertices. A morphism of bigraphs $f : \Gamma \rightarrow \Gamma'$ is defined as a pair $f_i : \Gamma_i \rightarrow \Gamma'_i$, $i = 0, 1$ commuting with s and e . If f_0 is embedding as a subset, then we say Γ is a subbigraph in Γ' and if besides $f_1(i, j)$ is the identity map for any $i, j \in \Gamma_0$, then we say Γ is a full subbigraph of Γ' .

A basis of a bimodule problem $\mathcal{A} = (\mathcal{C}, \mathcal{M})$ is a bigraph $\Gamma = \Gamma(\mathcal{A})$ such that $\Gamma_0 = \text{Ob } \mathcal{C}$, $\Gamma_1^0(i, j)$ is a basis in $\mathcal{M}(i, j)$, $i, j \in \Gamma_0$, $\Gamma_1^1(i, j)$ is a basis in $\mathcal{C}(i, j)$, $i \neq j \in \Gamma_0$ and $\Gamma_1^1(i, i)$ is a basis in $\text{Rad } \mathcal{C}(i, i)$.

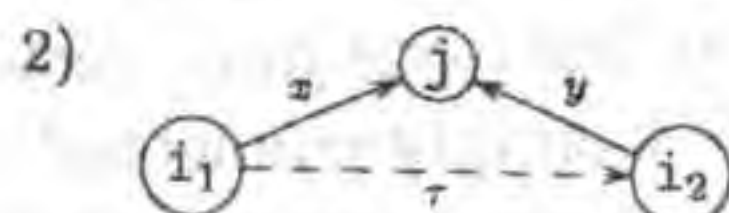
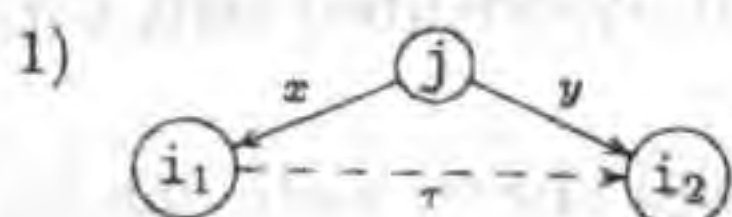
A basis Γ is called *multiplicative*, provided the composition of two composable arrows from Γ is an arrow in Γ . A multiplicative basis allows to construct combinatorially a covering of the bimodule problem (for details see 2). Below we recall the interpretation of this construction from 3. A bimodule problem $\mathcal{A}$ from Q_r is endowed with the standard multiplicative basis $\Gamma = \Gamma(\mathcal{A})$.

1.3 Two-dimensional cell complex associated with multiplicative basis

We consider the bimodule problem $\mathcal{A}$ such that underlying bigraph Γ has a multiplicative basis. Then we associate with $\mathcal{A}$ a 2-dimensional cell complex.

again denoted by Γ . The 1-skeleton of this complex coincides with Γ and to every triple $t = (a, b, c) \in \Gamma_1$ such that $ba = c$ corresponds a 2-dimensional triangular cell C_t with the boundary $\delta(C_t) = c^{-1}ba$. The 2-complex $\hat{\Gamma}$ of the universal covering $\hat{\mathcal{A}}$ of $\mathcal{A}$ is just the topological universal covering of the 2-dimensional cell complex Γ . In [3] is constructed a modified 2-dimensional cell complex

The triangle on the bigraph $\hat{\Gamma}$ is one of the following full fragments:



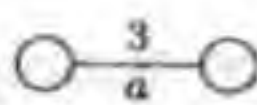
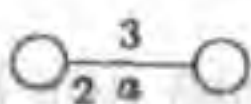
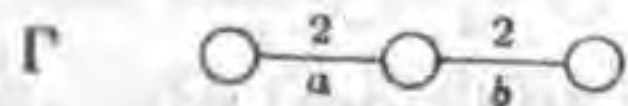
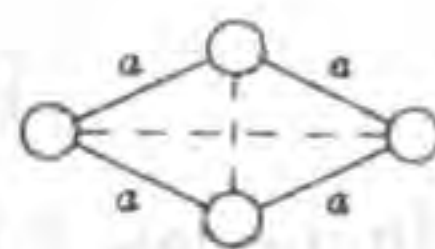
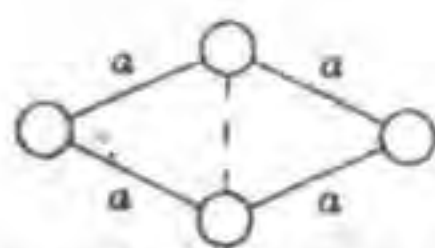
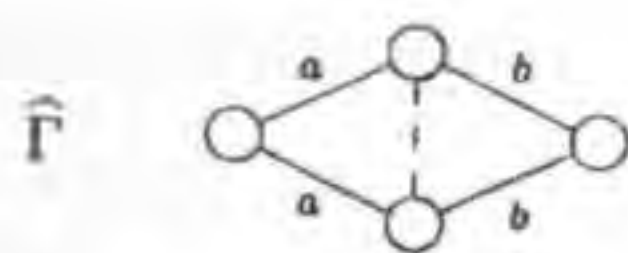
where for the both cases $\pi_0(i_1) = \pi_0(i_2)$, $\pi_1(x) = \pi_1(y)$, and 1) $\tau x = y$; 2) $y\tau = x$.

The solid edges from $\hat{\Gamma}$ (with or without orientation) are labeled by the edges of Γ (sometimes with the subindexes) such that the label of $x \in \hat{\Gamma}_1^0$ is $\pi_1(x) \in \Gamma_1^0$.

Remark 1. 1. Each subbigraph $\bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc$ on $\hat{\Gamma}$ brings one of the cases 1) or 2) above.

2. If $\hat{\Gamma}$ has a subgraph $\bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc$ then there is either $\bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc$ or $\bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc \xrightarrow{\tau} \bigcirc$. 3. There are no oriented cycles on $\hat{\Gamma}$.

The cell on $\hat{\Gamma}$ is a gluing of two triangles along the common dotted edge. We have the following cases as a full fragments (with the suitable orientation of the edges):



Here the bigraph Γ contains the indicated subbigraph as a subproblem.

1.4 Cell decomposition

Given a solid closed walk σ on $\hat{\Gamma}$ we say that the (plane) *cell decomposition* $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\sigma)$ of σ is given if σ is an unique outer boundary of gluing cells. All the vertices belonging to σ are called the boundary vertices of $\mathcal{L}$, the other vertices are called the inner vertices. Denote by $\mathcal{L}_0 = \mathcal{L}_0^\bullet \cup \mathcal{L}_0^\circ$ the vertex set

of $\mathfrak{L}$ divided onto the set $\mathfrak{L}_0^*$ of inner and the set $\mathfrak{L}_0^o$ of boundary vertex. And let $\mathfrak{L}_1$ denotes the set of (solid) edges from $\mathfrak{L}$.

The cell decomposition $\mathfrak{L}$ is called *minimal* provided each another decomposition with the same boundary contains either more sells or more inner vertices.

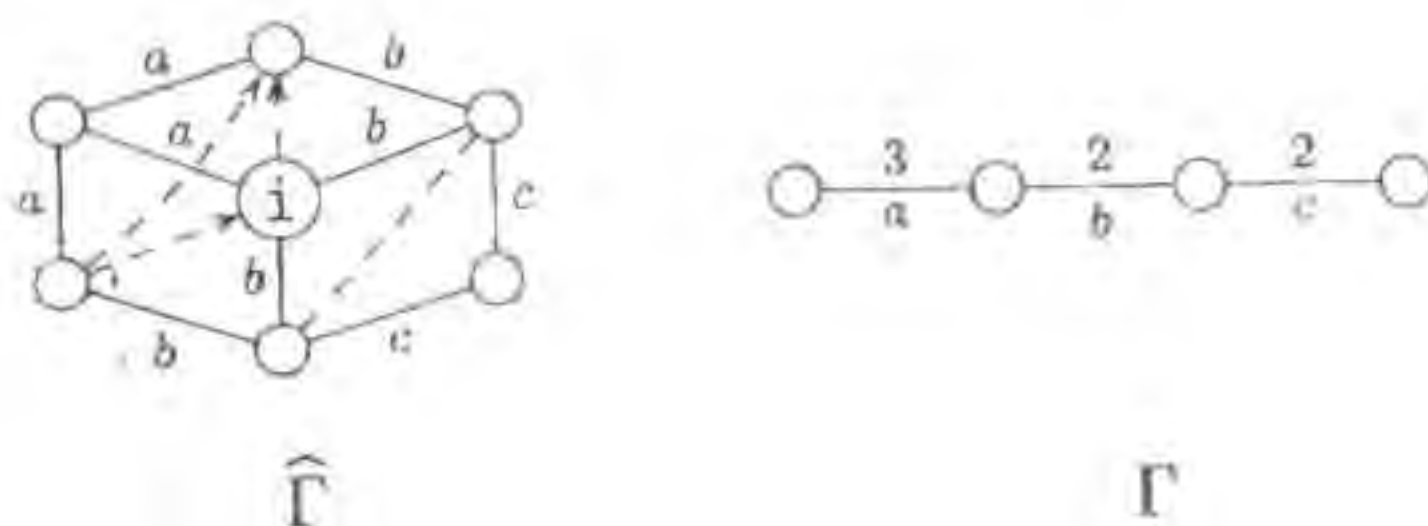
The corresponding cell decomposition on $\hat{\Gamma}$ is called *reduced* provided its boundary is a reduced closed (does not contain the subwalks of a shape aa^{-1} , $a^{-1}a$, $a \in \hat{\Gamma}_1^o$) and it does not contain oppositely oriented cells with the same label and at least one joint vertex.

Since $\hat{\Gamma}$ is simply connected, then any solid closed walk can be presented as triangle decomposition which can be obviously modified into the cell decomposition. Therefore, given any solid closed walk σ on $\hat{\Gamma}$ there exists the cell decomposition $\mathfrak{L}(\sigma)$.

Lemma 1. Assume the minimal reduced cell decomposition $\mathfrak{L}$ of solid closed walk to have an inner vertex $i \in \mathfrak{L}_0^*$. Then one of the following holds:

1). The original bigraph Γ has as a subbigraph one of the critical bigraphs $S6$, $E4$, $E8$, $E10$, $E18$, $E19$, $E56$ from the list in 2, and therefore the quadratic form $\chi_{\hat{A}}(X)$ is not weakly positive.

2). There is the following cell subdecomposition $\mathfrak{L}'$ of $\mathfrak{L}$ on $\hat{\Gamma}$ and the correspondent subbigraph on Γ :



Remark 2. In the case Γ has a subbigraph Γ' of a shape $\bigcirc \xrightarrow[3/a]{2} \bigcirc \xrightarrow[2/b]{2} \bigcirc \xrightarrow[2/c]{2} \bigcirc$ the full enveloping subbigraph of Γ' does not have any additional edge since otherwise we obtain one of the critical problems $S9$, $E29$, $E31$, $E59$ on Γ . Moreover, the edges a, b, c can not have the greater weight since otherwise we obtain one of the critical bigraphs $E17$, $E18$, $E19$ on Γ .

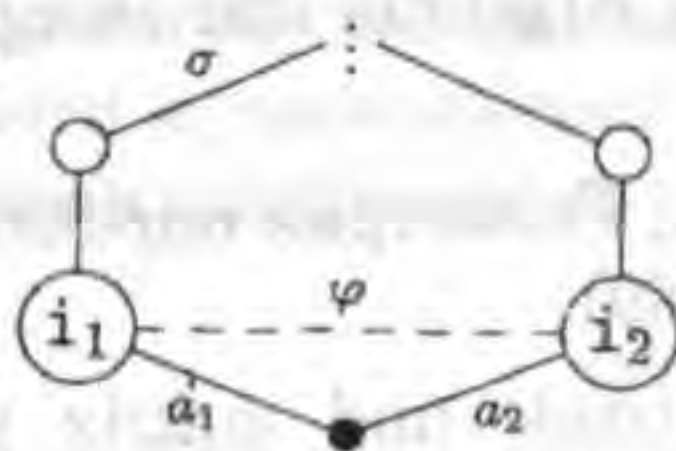
The sketch of the proof of lemma 1. If the edge $x \in \mathfrak{L}_1$ is an entry of some cell from $\mathfrak{L}$ then the weight of x is at least 2. Therefore, due to the exception $E56$ from the general list there are at most two labels which are attached to any vertex of $\mathfrak{L}_0$. The rest of the proof uses some combinatorics technique and the associativity condition for multiplication in $\mathcal{A}$.

2 Main result

Theorem 1. *Let $A \in Q_r$. Then there exists a covering morphism $\pi : \hat{A} \rightarrow A$, $\pi : \hat{\Gamma} \rightarrow \Gamma$ such that if Tits form $\chi_{\hat{A}}(X)$ is weakly positive, then for every indecomposable representation $\hat{M}$ of $\hat{A}$ the restriction of $\hat{A}$ to the support of $\hat{M}$ is a simply connected bimodule problem.*

The sketch of the proof.

1. To prove the statement it is sufficient to show that there does not exist trivially non-shurian bimodule subproblem of $\hat{A}$. Suppose the opposite. Then there exist an indecomposable representation $\hat{M} \in \text{Rep } \hat{A}$ with $S = \text{supp } \hat{M}$ such that the problem $\hat{A}_S = (\hat{\mathcal{C}}_S, \hat{\mathcal{M}}_S)$ has non zero annihilator ideal $\text{Ann}_{\hat{\mathcal{C}}_S} \hat{\mathcal{M}}_S \subset \text{Rad } \hat{\mathcal{C}}_S$ and the bimodule problem $\hat{A}'_S = (\hat{\mathcal{C}}_S / \text{Ann}_{\hat{\mathcal{C}}_S} \hat{\mathcal{M}}_S, \hat{\mathcal{M}}_S)$ is sincere shurian. Moreover, we can assume that there are $i_1, i_2 \in S$ such that $\text{Ann}_{\hat{\mathcal{C}}_S} \hat{\mathcal{M}}_S$ is concentrated on the set $\{i_1, i_2\}$ and $x = \dim_{\hat{A}'_S} \hat{\mathcal{M}}_S$ is a sincere positive root of $\chi_{\hat{A}'_S}$ with two special vertex i_1, i_2 .
2. The vertices i_1, i_2 are connected with the solid walk $\sigma : i_1 \rightarrow i_2$ on bigraph $\Gamma_{\hat{A}'_S}$ since the indecomposable representation $\hat{M}$ is sincere on $\hat{A}'_S$. Using the fact that the global annihilator $\text{Ann}_{\hat{\mathcal{C}}} \hat{\mathcal{M}}$ is trivial we obtain the subbigraph of the following type:

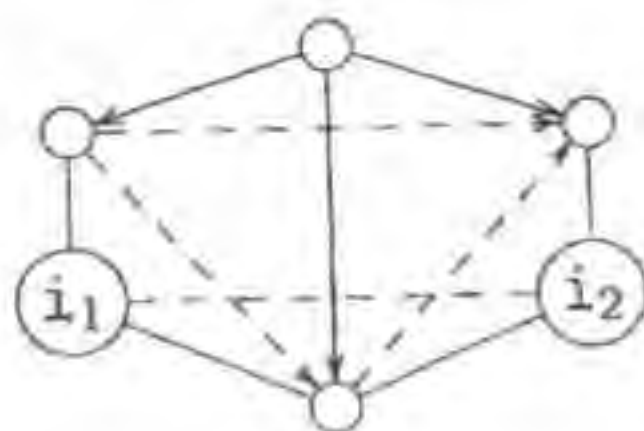


3. Since $\hat{A}$ is simply connected, then any solid closed walk on $\hat{\Gamma}$ can be presented as the cell decomposition.

If there exists an inner vertex of the minimal cell decomposition $\mathfrak{L}$ of solid closed walk, then due to the lemma 1 and remark 2 Γ contains either or one of the critical subbigraphs $S6, S9, E4, E8, E10, E17, E18, E19, E29, E31, E56, E59$ from the list published in [?], and therefore the quadratic form χ_A is not weakly positive, or the subbigraph $\bigcirc \xrightarrow[3]{a} \bigcirc \xrightarrow[2]{b} \bigcirc \xrightarrow[2]{c} \bigcirc$. The proof for the last case is considered separately.

So we can assume that cell decomposition does not contain inner vertices.

4. Some combinatorics technique reduces the minimal cell decomposition of the above considered solid closed walk to the following simple case



In the last case bimodule problem $\mathcal{A}$ contains some critical bimodule problem, and we have a contradiction with weakly positivity of quadratic form $\chi_{\hat{A}}(X)$.

Література

1. *S.M.Gersten*. Reducible Diagrams and Equations Over Groups, In: Essays in Group Theory, Mathematical Science Research Institute Publications, 8, Springer - Verlag, 1987, pp. 15-75.
2. *V. M. Babych, N. S. Golovashchuk*. An Application of Covering Techniques // Науковий вісник Ужгородського ун-ту. Сер. матем. і інформ. - 2003. - 8 - с. 4-14.
3. *Головащук Н. С.* Накрывающие некоторого класса свободных матричных задач // Доклады АН УССР, Сер. А, - 1987. - 10 - С. 3-5.
4. *Ringel C.M.*, Tame Algebras and Integral Quadratic Forms, Springer LNM, 1099, 1984.
5. *Ольшанский А.Ю.*, Геометрия определяющих соотношений в группах, М., Наука, (1989).
6. *S.Ovsienko*, Bimodule and matrix problems, Progress in Math., Vol.173, Birkhaeuser, (1999), 323-357.
7. *N. Golovashuk*, Maximal non degenerated forms, In book: "Quadratic forms in the Representation Theory", SFB 343, DSM 96-001, 1996, 12-1-12-16.

Надійшла до редакції 10.01.2006

УДК 512.54

Євген В. Бондаренко¹

Ievgen V. Bondarenko¹

Дії груп ітерованих монодромій гіперболічних квадратичних многочленів на кореневому дереві.

Actions of iterated monodromy groups of hyperbolic quadratic polynomials on rooted tree.

Знайдено нуклеуси дій груп ітерованих монодромій гіперболічних квадратичних многочленів на кореневому дереві. Встановлено інші властивості їхньої дії.

Nuclei of actions of iterated monodromy groups of hyperbolic quadratic polynomials on the rooted tree are described. Other properties of the actions are determined.

Ключові слова: самоподібні групи, стискуючі дії, нуклеус.

Key Words: self-similar groups, contracting actions, nucleus.

¹ E-mail: ibond@math.tamu.edu

Вступ

Теорія самоподібних груп розвивається інтенсивно останні два десятиліття (див. [1,2]). Важливим класом прикладів самоподібних груп є так звані групи ітерованих монодромій пост-критично скінченних раціональних функцій (див. [2]). Цей приклад будує зв'язок між класичною динамікою і самоподібними діями.

В даній роботі досліджується дія груп ітерованих монодромій гіперболічних квадратичних многочленів на бінарному кореневому дереві. Основним результатом роботи є знаходження їхнього нуклеусу. Також показано, що дії є рекурентними і слабо гіллястими.

2. Основна частина

Нехай X – скінченна множина, яку ми будемо називати алфавітом. Символом X^* ми позначимо множину всіх скінченних слів $x_1x_2\dots x_n$ над алфавітом X , включаючи порожнє слово $\emptyset$. Довжину слова $v = x_1x_2\dots x_n$ ми позначимо $|v|$.

Множина X^* природним чином представляється як кореневе дерево. А саме, корінь дерева це порожнє слово $\emptyset$ і кожне слово $v \in X^*$ з'єднано ребром з vx , для кожного $x \in X$. Множина X^n слів довжини n називається n -тим рівнем дерева. При $|X| = 2$ дерево X^* будемо називати бінарним.

Для кожного слова $v \in X^*$ розглянемо піддерево vX^* . Нехай $g \in \text{Aut} X^*$. Розглянемо автоморфізм $g|_v: X^* \rightarrow X^*$ такий, що $g|_v(x) = y \Leftrightarrow$

$g(vx) = uv$ для деякого $u \in X^*$, $|u| = |v|$. Автоморфізм $g|_v$ називається обмеженням g на слові v або станом g у слові v .

Кожен автоморфізм $g \in \text{Aut} X^*$ індукує підстановку $\pi \in S(X)$ на першому рівні дерева та обмеження $g|_x, x \in X$, причому різним автоморфізмам відповідають різні такі набори. Тому автоморфізми можна записувати у вигляді $g = (g|_1, \dots, g|_X)\pi$, що, фактично, повторює канонічне зображення елементів вінцевого добутку $\text{Aut} X^* \approx S(X) \wr \text{Aut} X^*$.

Означення. Точна дія групи G на просторі X^* ($G < \text{Aut} X^*$) називається самоподібною, якщо для кожних $g \in G$ та $x \in X$ існують $h \in G$ і $y \in X$ такі, що для всіх $w \in X^*$ виконується співвідношення $g(xw) = yh(w)$.

Означення. Підмножина S групи G називається самоподібною, якщо всі стани кожного з елементів з S знову лежать в S .

Для кожного $x \in X$ позначимо через $St_G(x)$ стабілізатор слова x в групі G . Визначимо гомоморфізм $\phi_x : St_G(x) \rightarrow G$ за формулою $\phi_x(g) = g|_x$.

Означення. Самоподібна дія (G, X^*) називається рекурентною, якщо $\phi_x(St_G(x)) = G$.

Важливим підкласом класу самоподібних груп є клас стискуючих груп.

Означення. Самоподібна дія групи G називається стискуючою, якщо існує скінченна множина $N \subset G$ така, що для кожного $g \in G$ існує $k \in \mathbb{N}$ таке, що $g|_v \in N$ для всіх слів $v \in X^*$ довжини $\geq k$. Довільна множина N з такою властивістю називається квазінуклеусом. Мінімальне з квазінуклеусів називається нуклеусом групи.

Нуклеус можна визначати як множину:

$$N = \bigcup_{k \in \mathbb{N}} \bigcap_{g \in G} \{g|_v : v \in X^*, |v| \geq k\}.$$

Будемо говорити, що елемент $g \in G$ стискується до множини $S \subset G$, якщо існує рівень $n \in \mathbb{N}$ такий, що для кожного $v \in X^n$ $g|_v \in S$.

Покладемо $X = \{0, 1\}$. Визначимо клас груп G_ω .

Означення. Для довільного слова $\omega = \omega_1 \dots \omega_l \in X^*$ визначимо групу автоморфізмів бінарного кореневого дерева $G_\omega = \langle g_1, \dots, g_l \rangle$, де:

$$g_1 = (1, g_1)^\omega \sigma, \quad g_2 = (1, g_2)^\omega, \quad \dots, \quad g_l = (1, g_l)^\omega$$

$$\text{де } (x, y)^1 = (x, y), \quad (x, y)^0 = (y, x).$$

(Якщо $|\omega| = 1$, тоді $g_1 = (1, g_1)^\omega \sigma$)

Групи G_ω природно з'являються при дослідженні дії груп ітерованих монодромій квадратичних многочленів на кореновому дереві (див. [1, 2, 3]). Більш того, всі групи ітерованих монодромій пост-критично скінченних квадратичних многочленів $z^2 + c$, де c – не є точкою Місюевича, мають

такий вигляд (див. [3]).

Помітимо, що кожен твірний g_i має нескінченний порядок. Дійсно, з рівностей

$$g_1^{2^n} = (g_1^{2^{n-1}}, g_2^{2^{n-1}}), g_2^{2^n} = (1, g_3^{2^n})^{\omega_2}, \dots, g_t^{2^n} = (1, g_1^{2^n})^{\omega_t}$$

за індукцією маємо, що $g_i^{2^n} \neq 1$ для всіх $n \in \mathbb{N}$. І, оскільки g_i є автоморфізмом бінарного дерева, g_i має нескінченний порядок.

Покажемо, що групи G_ω стискуючі, і знайдемо їхній нуклеус. Для цього нам будуть потрібні деякі леми і наступне означення.

Означення. Слово $\omega \in X^*$ називається періодичним, якщо існує $v \in X^*$ таке, що $|v| < |\omega|$ і $\omega = v \dots v$. Якщо такого слова v не існує, то ω називається неперіодичним.

Надалі, маючи слово $\omega \in X^*$, під ω_k , $k \in \mathbb{Z}$ будемо розуміти k -ту літеру нескінченного в обидва боки слова $\dots \omega \omega \omega \dots$, нумерація літер в якому продовжує нумерацію літер ω .

Лема 1. Нехай $\omega \in X^n$ і існують $i, j \in \{1, \dots, n\}$, $i \neq j$, такі, що для всіх $k \in \mathbb{N}$ виконується рівність $\omega_{i+k} = \omega_{j+k}$. Тоді $\omega = v \dots v$, де $|v| = \text{НСД}(|i-j|, n)$.

Доведення. Нехай $d = \text{НСД}(|i-j|, n)$. Тоді існують $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}$ такі, що $d = (i-j)\alpha + n\beta$. З умов леми випливає, що для довільного $k \in \mathbb{N}$ $\omega_{i-j+k} = \omega_k$. Тоді для довільного $k \in \mathbb{N}$ $\omega_k = \omega_{i-j+k} = \omega_{(i-j)\alpha+k} = \omega_{(i-j)\alpha+n\beta+k} = \omega_{d+k}$. Отже, $\omega = v \dots v$, де $v = \omega_1 \dots \omega_d$. Лему доведено.

Лема 2. Нехай $\omega \in X^n$. Якщо $\omega = v \dots v$ і $\omega = \tau \dots \tau$, де $v, \tau \in X^*$, причому v неперіодичне, тоді $\tau = v \dots v$.

Доведення. Нехай $l = |\tau|$, $m = |v|$, $d = \text{НСД}(l, m)$. Тоді існують $\alpha, \beta \in \mathbb{Z}$ такі, що $d = l\alpha + m\beta$. Тоді для всіх $k \in \mathbb{N}$: $\omega_k = \omega_{l\alpha+k} = \omega_{l\alpha+m\beta+k} = \omega_{d+k}$. Отже, $\omega = v \dots v$, де $|v| = d$. Але $d \mid m$, а v – неперіодичне, тому $m = d$. Отже, $m \mid l$ а тому $\tau = v \dots v$. Лему доведено.

Теорема. G_ω – стискуюча група з нуклеусом

$$N(G_\omega) = \{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\} \cup \{g_i^{-1} g_j \mid i \equiv j \pmod{|\tau|}\}$$

де τ – неперіодичне слово таке, що $\omega = \tau \dots \tau$.

Доведення. Спочатку доведемо, що для довільних $i, j \in \{1, \dots, t\}$ елемент $g_i g_j$ стискається до елементів з множини $\{1, g_1, \dots, g_t\}$. Для цього запишемо добуток $g_i g_j$ в такому вигляді:

$$\text{при } i \neq 1, j \neq 1 \quad g_i g_j = \begin{cases} (g_{i+1}, g_{j+1})^{\omega_i}, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \\ (1, g_{i+1} g_{j+1})^{\omega_i}, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \end{cases}$$

$$\text{при } j \neq 1 \quad g_i g_j = \begin{cases} (g_{i+1}, g_2)^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \\ (1, g_2 g_{i+1})^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{при } i \neq 1 \quad g_i g_j = \begin{cases} (g_2, g_{i+1})^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \\ (1, g_{i+1} g_2)^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \\ g_i^2 = (g_2, g_2) \end{cases}$$

Припустимо $g_i g_j$ не стискається до елементів $\{1, g_1, \dots, g_t\}$. Тоді обмеженням $g_i g_j$ на слова довжини $t+1-i$ будуть одиниці і $g_1 g_k$ (де $k = t+1+j-i$). Отже і $g_1 g_k$ не стискається до $\{1, g_1, \dots, g_t\}$. Тоді з (4) випливає, що $\omega_i \neq \omega_k$ і при $m = 2, \dots, t$ $\omega_m = \omega_{m+k-1}$. З другої умови маємо: $\omega_{t+1-(k-1)} = \omega_1$, $\omega_{t+1-2(k-1)} = \omega_{t+1-(k-1)}$, $\dots$, $\omega_{t+1-(t-2)(k-1)} = \omega_{t+1-(t-1)(k-1)} = \omega_k$. Протиріччя з першою умовою.

Аналогічно доводиться, що $g_i g_j^{-1}$ і $g_i^{-1} g_j$ стискаються до елементів $\{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\}$.

Тепер доведемо, що якщо $|i-j|$ не ділиться на $|\tau|$, то $g_i^{-1} g_j$ стискається до елементів $\{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\}$. Для цього запишемо добуток $g_i^{-1} g_j$ в наступному вигляді:

$$\begin{aligned} \text{при } i \neq 1, j \neq 1 \quad g_i^{-1} g_j &= \begin{cases} (g_{i+1}^{-1}, g_{j+1})^{\omega_i}, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \\ (1, g_{i+1}^{-1} g_{j+1})^{\omega_i}, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \end{cases} \\ \text{при } j \neq 1 \quad g_i^{-1} g_j &= \begin{cases} (g_{i+1}^{-1}, g_2^{-1})^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \\ (g_i^{-1} g_{i+1}, 1)^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \end{cases} \\ \text{при } i \neq 1 \quad g_i^{-1} g_j &= \begin{cases} (g_2, g_{i+1}^{-1})^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i \neq \omega_j \\ (1, g_{i+1}^{-1} g_2)^{\omega_i} \sigma, & \text{якщо } \omega_i = \omega_j \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

Припустимо $g_i^{-1} g_j$ не стискається до $\{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\}$. Тоді, як видно з (5), $\omega_i = \omega_j$, $\omega_{i+1} = \omega_{j+1}$, $\dots$. Тоді за лемою 1 $\omega = v \dots v$, де $|v| = \text{НСД}(|i-j|, |\omega|)$, а тоді за лемою 2 $v = \tau \dots \tau$. Звідси випливає, що $|i-j|$ ділиться на $|\tau|$. Протиріччя.

Розглянемо множину $N = \{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\} \cup \{g_i^{-1} g_j \mid i \equiv j \pmod{|\tau|}\}$. Оскільки $g_i g_j$, $g_i^{-1} g_j^{-1}$, $g_i g_j^{-1}$ і $g_i^{-1} g_j$, якщо $|i-j|$ не ділиться на $|\tau|$, стискається до елементів $\{1, g_1, \dots, g_t, g_1^{-1}, \dots, g_t^{-1}\}$, то довільний елемент групи буде стискуватися до елементів з множини N . Тобто N квазінуклеус групи G_ω . Доведемо, що це нуклеус. Елементи $\{1, g_1, g_1^{-1}\}$ належать нуклеусу, оскільки для кожного $s \in \{1, g_1, g_1^{-1}\}$ і довільного $n \in N$

існує $v \in X^*$, $|v| \geq n$ таке, що $g_i|_v = s$ або $g_i^{-1}|_v = s$. Розглянемо елемент $g_i^{-1}g_j \in N$. Оскільки $i \equiv j \pmod{|\tau|}$, то $\omega_{i+n} = \omega_{j+n}$ для довільного $n \in N \cup \{0\}$. Звідси випливає:

$$\begin{aligned} g_i^{-1}g_j &= (1, g_{i+1}^{-1}g_{j+1})^{\omega_1} \\ g_{i+1}^{-1}g_{j+1} &= (1, g_{i+2}^{-1}g_{j+2})^{\omega_2} \\ &\dots \\ g_{i-1}^{-1}g_{j-1} &= (1, g_i^{-1}g_j)^{\omega_{i-1}} \end{aligned} \quad (6)$$

і в (6) будуть з'являтися вирази: $g_i^{-1}g_j = (g_2^{-1}g_{j+1}, 1)^{\omega_1} \sigma$ і $g_i^{-1}g_i = (1, g_{i+1}^{-1}g_2)^{\omega_1} \sigma$. Отже, $g_i^{-1}g_j$ рекурентно визначається через себе і тому належить нуклеусу. Крім того, легко бачити, що жодні два елемента з N не рівні між собою. Отже, N – нуклеус групи G_ω . Теорему доведено.

Твердження 1. Самоподібна дія (G_ω, X^*) є рекурентною.

Доведення. Розглянемо гомоморфізм $\phi: g \rightarrow g|_1$. З визначення твірних групи маємо:

$$\text{при } i \neq 1 \quad \phi(\{g_i, g_i^{-1}g, g_1, g_1g, g_i^{-1}\}) \supset \{g_{i+1}\} \quad \text{і} \quad \phi(g_i^2) = g_2.$$

Отже, $\phi(St_{G_\omega}(x))$ містить усі твірні групи G_ω , а тому $\phi(St_{G_\omega}(x)) = G_\omega$. Твердження доведено.

Наслідок. Дія (G_ω, X^*) транзитивна на рівнях дерева.

Твердження 2. При $|\omega| > 1$ група G_ω є слабко гіллястою, тобто

1. G_ω діє транзитивно на рівнях дерева.
2. Для кожної вершини $v \in X^*$ існує нетривіальний $g \in G_\omega$, який діє тільки на піддереві vX^* , і фіксує його доповнення.

Доведення. Транзитивність на рівнях ми вже маємо. Не втрачаючи загальності, можна вважати, що $\omega_1 = 0$. Розглянемо комутант H групи G_ω . Оскільки:

$$[g_i, g_i] = (1, g_2^{-1})\sigma(1, g_i^{-1})^{\omega_1}(g_2, 1)\sigma(1, g_i)^{\omega_1} = \begin{cases} (g_1, g_2^{-1}g_i^{-1}g_2), & \text{якщо } \omega_1 = 0, \\ (g_i^{-1}, g_i), & \text{якщо } \omega_1 = 1. \end{cases}$$

маємо, що $H \neq \{1\}$. Доведемо, що $H \geq H \times H$, як геометричне вкладення індуковане обмеженням на піддерева першого рівня дерева X^* .

Для кожного $g, i \neq 2$, існують $h_1, h_2 \in G_\omega$ такі, що $h_1 = (g_i, 1)$ і $h_2 = (1, g_i)$. Дійсно, якщо $g_{i-1} = (g_i, 1), i \neq 2$, то $g_1g_{i-1}g_i^{-1} = (1, g_i)$; якщо $g_{i-1} = (1, g_i)$, то $g_i^{-1}g_{i-1}g_1 = (g_i, 1)$. Тоді для довільних $g_i, g_j, i, j \neq 2$, існують $g, h \in G_\omega$ такі, що $[g, h] = ([g_i, g_j], 1)$ і існує $h = (g_i, 1)$, тоді $[g_i^2, h] = ([g_i, g_i], 1)$. Крім того, для кожного g_k маємо $f^{-1}[g, h]f = (g_k^{-1}[g_i, g_j]g_k, 1)$, де $f = (g_k, 1)$, при $k \neq 2$, і $f = g_1^2 = (g_2, g_2)$,

при $k = 2$. Отже, $H \geq H \times 1$. Аналогічно доводиться, що $H \geq 1 \times H$. Отже, $H \geq H \times H$. Це можна ітерувати і отже, G_∞ містить копію H , яка діє тільки на піддереві vX^* . Твердження доведено.

3. Висновки

Результати роботи можуть бути використані при подальшому вивченні граничних просторів груп ітерованих монодромій квадратичних многочленів, а це в свою чергу дозволяє досліджувати множини Жуліа відповідних многочленів. Крім того, опис нуклеусу цих груп дозволяє зробити оцінку складності алгоритму, що розв'язує проблему слів в цих групах (див. [4]).

Література

1. Bartholdi L., Grigorchuk R.I., Nekrashevych V.V. From fractal groups to fractal sets.// In Peter Grabner and Wolfgang Woess, editors, Fractals in Graz 2001. Analysis -- Dynamics -- Geometry -- Stochastics. -- 2003. -- с. 25-118.
2. Nekrashevych V. Self-similar groups. -- AMS, 2005.
3. Bartholdi L., Nekrashevych V. Iterated monodromy groups of quadratic polynomials. -- Preprint, 2003.
4. Savchuk D. On word problem in contracting automorphism groups of rooted trees// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. -- 2003. -- 1. -- с. 51-56.

Надійшла до редакції 07.09.2005

УДК 512.554.314

Наталія В. Бондаренко¹

**Алгебри Лі асоційовані з
силовськими p -підгрупами
деяких класичних лінійних груп**

Вивчаються алгебри Лі асоційовані з центральними рядами силовськими p -підгрупами класичних лінійних груп $GL(n, p)$ і $SL(n, p)$ над полем з p елементів (p -просте число). Показано, що алгебра Лі асоційована з центральним рядом групи унітрикутних матриць $UT(n, p)$ ізоморфна алгебрі Лі $T(n, p)$ 0-трикутних матриць. Побудовано занурення алгебри $T(n, p)$ в алгебру Лі L_n асоційовану з нижнім центральним рядом силовської p -підгрупи симетричної групи степеня p^n .

Ключові слова: Алгебри Лі, Алгебра Лі асоційована з нижнім центральним рядом групи, класичні лінійні групи.

Nataliya V. Bondarenko¹

**Lie algebras associated with
Sylow p -subgroups of some
classical linear groups**

We study Lie algebras associated with the central series of Sylow p -subgroups of classical linear groups $GL(n, p)$ and $SL(n, p)$ over a field with p elements (p is a prime). It is shown that the Lie algebra associated with the central series of the group $UT(n, p)$ is isomorphic to Lie algebra $T(n, p)$ of 0-triangular matrices. The embedding of Lie algebra $T(n, p)$ to Lie algebra L_n associated with the Sylow p -subgroups of symmetric groups of degree p^n is constructed.

Key Words: Lie algebra, Lie algebra associated with the lower central series of a group, classical linear groups.

E-mail: netr@univ.kiev.ua

Вступ

Конструкція алгебр Лі асоційованих з центральними рядами нільпотентно апроксимованих груп, яку іноді називають конструкцією М. Лазарка, знайшла широке застосування в різноманітних розділах теорії груп і теорії проскінченних груп [8], [9]. Завдяки методам теорії алгебр Лі стало можливим дослідження цілого ряду теоретико-групових проблем, однією з найбільш відомих серед яких є послаблена проблема Бернсайда. Використання асоційованих з групами алгебр Лі дозволяє використовувати лінійні методи в обчисленнях та доведеннях, здійснювати переформулювання теоретико-групових проблем в лієвих термінах. Завдяки ефективності методів алгебр Лі, вивченню алгебр Лі різноманітних груп на сьогоднішній день приділяється велика увага.

В даній роботі досліджуються алгебри Лі над полем з p елементів стандартним чином асоційовані з центральними рядами силовських p -підгруп двох типів класичних лінійних груп над полем з p -елементів: $GL(n, p)$ і $SL(n, p)$, $n \geq 2$. Силовською p -підгрупою повної та спеціальної

лінійних груп вимірності n над F_p є група унітрикутних матриць $UT(n, p)$. Добре відомо, що верхній і нижній центральні ряди групи $UT(n, p)$ збігаються, тобто вона має тільки один центральний ряд. В теоремі 1 встановлюється, що алгебра Лі, асоційована з центральним рядом цієї групи ізоморфна алгебрі Лі $T(n, p)$ 0-трикутних матриць над полем F_p . В теоремі 2 ми будемо природне занурення алгебри Лі $T(n, p)$ 0-трикутних матриць над F_p в алгебру Лі L_n асоційовану з нижнім центральним рядом силовської p -підгрупи симетричної групи степеня p^n . Також показано, що алгебра Лі L_n занурюється в алгебру Лі 0-трикутних матриць $T(m, p)$, де $m = p^{n-1} + 1$, і не може бути занурена в алгебру $T(m, p)$ меншої розмірності.

2. Основна частина

Нехай $T(n, p)$ – алгебра Лі (верхніх) 0-трикутних матриць над полем F_p , тобто матриць вигляду

$$\begin{pmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

елементи a_{ij} вище головної діагоналі яких є довільними елементами поля F_p , $(1 \leq i < j \leq n)$, а всі інші елементи нульові. Коротко позначимо 0-трикутну матрицю символом $\|a_{ij}\|_{j>i}$.

Нехай $A = \|a_{ij}\|_{j>i}$, $B = \|b_{ij}\|_{j>i} \in T(n, p)$. Операції додавання, множення на елементи поля F_p та дужка Лі в алгебрі $T(n, p)$ визначаються таким чином:

- (i) $\|a_{ij}\|_{j>i} + \|b_{ij}\|_{j>i} = \|a_{ij} + b_{ij}\|_{j>i}$;
- (ii) $\alpha \cdot \|a_{ij}\|_{j>i} = \|\alpha \cdot a_{ij}\|_{j>i}, \alpha \in F_p$;
- (iii) $(A, B) = A \cdot B - B \cdot A$.

За додаванням алгебра $T(n, p)$ очевидно є елементарною абелевою групою порядку $p^{\frac{n(n-1)}{2}}$. Розмірність алгебри Лі $T(n, p)$ дорівнює $\frac{n(n-1)}{2}$.

Нагадаємо загальну конструкцію кільця Лі асоційованого з групою (див. [4]).

Нехай G – деяка група. N-рядом називається скінчений або нескінченний ряд $\{G_n\}$ нормальних підгруп групи G таких, що

$$G_1 = G, \quad G_{n+1} \leq G_n \text{ і } [G_m, G_n] \leq G_{m+n} \text{ для всіх } m, n \geq 1.$$

Тоді кільце асоційоване з цим рядом є прямою сумою його факторів

$$L(G) = \bigoplus_{i=1}^{\infty} G_i / G_{i+1},$$

з дужкою Лі, яка визначена на однорідних елементах $L(G)$ рівністю

$$(\bar{u}, \bar{v}) = (u \cdot G_{i+1}, v \cdot G_{j+1}) = [u, v] \cdot G_{i+j+1},$$

а на довільні елементи із $L(G)$ поширюється за дистрибутивністю.

Якщо кожна фактор-група G_i / G_{i+1} , $(i=1, 2, \dots)$ є елементарною абелевою p -групою для фіксованого простого числа p , то кожен з факторів, а отже, і все кільце $L(G)$ можна ототожнити з адитивною групою векторного простору відповідної розмірності над полем F_p . В цьому випадку можна ввести додатково операцію множення елементів $L(G)$ на елементи поля F_p , що перетворює кільце $L(G)$ на алгебру Лі над полем F_p .

З визначення N-ряду $\{G_n\}$ групи G зокрема випливає, що для довільного n має місце включення $(G, G_n) \subseteq G_{n+1}$ (якщо N-ряд скінченний і має довжину s , то співвідношення виконується для $n=1, 2, \dots, s-1$). А тому, кожен N-ряд є центральним рядом групи G . Зокрема, N-рядом є нижній центральний ряд групи G . Застосуємо описану вище конструкцію до силовської p -підгрупи $UT(n, p)$ лінійних груп $GL(n, p)$ і $SL(n, p)$.

Позначимо $UT^m(n, p)$ – підгрупу матриць із $UT(n, p)$ з $m-1$ нульовими діагоналями вище головної ($m=1, 2, \dots, n$).

Лема. k -тий член нижнього центрального ряду групи $UT(n, p)$ збігається з $n-k$ -тим членом її верхнього центрального ряду і дорівнює $UT^k(n, p)$.

Доведення. Індукція за числом k (див. наприклад [2]).

Наслідок. Кожен N-ряд групи $UT(n, p)$ збігається з її нижнім центральним рядом. Група $UT(n, p)$ – нільпотентна класу $n-1$.

Теорема 1. Алгебра Лі $L(UT(n, p))$ асоційована з нижнім центральним рядом групи унітрикутних матриць $UT(n, p)$ ізоморфна алгебрі Лі $T(n, p)$.

Доведення. Нехай $\{\gamma_k(UT(n, p))\}$, $1 \leq k \leq n-1$, – нижній центральний ряд групи $UT(n, p)$. Тоді

$$L(UT(n, p)) = \bigoplus_{k=1}^{n-1} \gamma_k(UT(n, p)) / \gamma_{k+1}(UT(n, p)),$$

Причому факторгрупа $\gamma_k(UT(n, p)) / \gamma_{k+1}(UT(n, p)) = UT^k(n, p) / UT^{k+1}(n, p)$ є елементарною абелевою p -групою порядку p^{n-k} , $k=1, 2, \dots$. Представниками класів суміжності $\gamma_k(UT(n, p))$ за $\gamma_{k+1}(UT(n, p))$ є унітрикутні матриці з $UT^k(n, p)$, у яких k -та діагональ (рахуємо починаючи з першої діагоналі вище головної) ненульова, а всі інші елементи нульові.

Для елементів $\bar{A} = A \cdot \gamma_{k+1}(UT(n, p)) \in \gamma_k(UT(n, p)) / \gamma_{k+1}(UT(n, p))$, $\bar{B} = B \cdot \gamma_{k+1}(UT(n, p)) \in \gamma_k(UT(n, p)) / \gamma_{k+1}(UT(n, p))$ маємо

$$(\bar{A}, \bar{B}) = [A, B] \cdot \gamma_{k+1}(UT(n, p))$$

На довільні елементи $L(UT(n, p))$ дужка Лі поширюється за дистрибутивністю.

Розглянемо відображення $\varphi: T(n, p) \rightarrow L(UT(n, p))$, яке кожній 0-трикутній матриці $A = \|a_{ij}\|_{j \geq i}$ ставить у відповідність елемент алгебри $L(UT(n, p))$, визначене таким чином

$$\varphi(A) = \bigoplus_{k=1}^{n-1} \|a_{i(k+i)}\|^k \cdot \gamma_{k+1}(UT(n, p))$$

де $\|a_{i(k+i)}\|^k = \|a_{i(k+i)}\|_{i=1, \dots, n-k}$ – матриця з $UT^k(n, p)$, у якій, крім головної одиничної діагоналі, ненульовою є k -та діагональ, причому елементи k -тої діагоналі рівні елементам k -тої діагоналі матриці A . За побудовою відображення φ є взаємно однозначним.

Кожну 0-трикутну матрицю $A = \|a_{ij}\|_{j \geq i}$ можна подати у вигляді лінійної комбінації матричних одиниць E_{ij} , тобто $A = \sum_{j \geq i} a_{ij} \cdot E_{ij}$, де $a_{ij} \in F_p$.

Легко перевіряється, що відображення φ є лінійним. Тому рівність $\varphi((A, B)) = (\varphi(A), \varphi(B))$ достатньо перевірити для матричних одиниць E_{kj} та E_{is} із $T(n, p)$ для різних наборів індексів (k, j) та (i, s) . В алгебрі Лі $L(UT(n, p))$ при відображенні φ їм будуть відповідати однорідні елементи $\hat{E}_{kj} = e_{kj} \cdot \gamma_{k+1}(UT(n, p))$, $\hat{E}_{is} = e_{is} \cdot \gamma_{s+1}(UT(n, p))$, де $t = j - k$, $r = s - i$, а $e_{kj} = E + E_{kj} \in \gamma_k(UT(n, p))$, $e_{is} = E + E_{is} \in \gamma_s(UT(n, p))$, E – одинична матриця.

При $i = j$, $k < s$ маємо

$$\varphi((E_{kj}, E_{is})) = \varphi(E_{kj}E_{is} - E_{is}E_{kj}) = \varphi(E_{kr}) = \hat{E}_{kr},$$

$$(\varphi(E_{kj}), \varphi(E_{is})) = (\hat{E}_{kj}, \hat{E}_{is}) = [e_{kj}, e_{is}] \cdot \gamma_{k+r+1}(UT(n, p)) = e_{kr} \cdot \gamma_{k+r+1}(UT(n, p)) = \hat{E}_{kr}$$

Якщо $k = s$, $j > i$, то $(E_{kj}, E_{is}) = -(E_{is}, E_{kj})$ і отримуємо попередній випадок.

При всіх інших індексах $\varphi((E_{kj}, E_{is})) = \varphi(E_{kj}E_{is} - E_{is}E_{kj}) = \varphi(0) = 0$, при цьому

$$(\varphi(E_{kj}), \varphi(E_{is})) = (\hat{E}_{kj}, \hat{E}_{is}) = [e_{kj}, e_{is}] \cdot \gamma_{i+r+1}(UT(n, p)) = E \cdot \gamma_{i+r+1}(UT(n, p)) = 0$$

Отже, побудована бієкція φ узгоджена з дужкою Лі. $\square$

Будова алгебри Лі 0-трикутних матриць $T(n, p)$ тісно пов'язана з будовою алгебри Лі L_n , асоційованої з силовською p -підгрупою P_n симетричної групи степеня p^n [6]. Елементи цієї алгебри зображуються трикутними таблицями вигляду

$$u = [u_1, u_2(x_1), \dots, u_n(x_1, \dots, x_{n-1})],$$

де $u_i \in F_p$, $u_i(x_1, \dots, x_{i-1})$ — редукований за модулем ідеала $\langle x_1^p, \dots, x_{i-1}^p \rangle$, поліном над полем F_p . k -ту координату таблиці u позначимо символом $\{u\}_k$.

Операції в алгебрі Лі L_n визначені в покоординатній формі при довільних $u, v \in L_n$ рівностями:

- (i) $\{u + v\}_k = \{u\}_k + \{v\}_k$;
- (ii) $\{\alpha \cdot u\}_k = \alpha \cdot \{u\}_k$, де $\alpha \in F_p$;
- (iii) $\{(u, v)\}_k = \sum_{i=1}^{k-1} \left(\frac{\partial \{v\}_k}{\partial x_i} \{u\}_i - \{v\}_i \frac{\partial \{u\}_k}{\partial x_i} \right)$.

Має місце наступна теорема.

Теорема 2. Алгебра Лі $T(n, p)$ занурюється в алгебру Лі L_n , так що її образ при такому зануренні складається з таблиць, компоненти яких є многочленами першого степеня без вільних членів. При цьому зануренням буде відображення $\varphi: T(n, p) \rightarrow L_n$ визначене рівністю

$$\varphi(\|a_{ij}\|_{j \geq i}) = [0, a_{12}x_1, a_{13}x_1 + a_{23}x_2, \dots, \sum_{i=1}^{n-1} a_{in}x_i]$$

Доведення. Відображення φ є взаємно однозначним безпосередньо за визначенням, а тому залишається перевірити його узгодженість з операціями. Відносно додавання і множення на елементи поля F_p це знову ж таки випливає з означення. Узгодженість з дужкою Лі достатньо перевірити для матричних одиниць E_{kj}, E_{is} алгебри $T(n, p)$. Помітимо, що $\varphi(E_{kj}) = [0, \dots, x_k, \dots, 0]$ — таблиця з ненульовою j -ю координатою, тобто " j -координатна" таблиця.

При $i = j$, $k < s$ маємо

$$\varphi((E_{kj}, E_{is})) = \varphi(E_{kj}E_{is} - E_{is}E_{kj}) = \varphi(E_{is}) = [0, \dots, x_k, \dots, 0],$$

$$(\varphi(E_k), \varphi(E_s)) = ([0, \dots, x_k, \dots, 0], [0, \dots, x_s, \dots, 0]) = [0, \dots, x_k, \dots, 0],$$

і в першому і в другому випадку $[0, \dots, x_k, \dots, 0]$ – s -координатною таблицею.

При $k = s$, $(A, B) = -(B, A)$ і ми можемо використати попередній випадок.

При всіх інших індексах $\varphi((E_k, E_s)) = \varphi(E_k E_s - E_s E_k) = 0$, при цьому

$$(\varphi(E_k), \varphi(E_s)) = ([0, \dots, x_k, \dots, 0], [0, \dots, x_s, \dots, 0]) = 0.$$

Отже, таким чином побудоване відображення φ є ізоморфізмом алгебри Лі $T(n, p)$ та підалгебри L_n , що складається з трикутних таблиць, координатами яких є многочлени першого степеня без вільних членів. $\square$

Зауважимо також, що алгебра Лі $T(n, p)$ занурюється також в алгебру L_{n-1} . Образ при такому зануренні складається з таблиць, компоненти яких є многочленами першого степеня. При цьому ізоморфізмом буде відповідність

$$\|a_i\|_{i \geq 1} \mapsto [a_{12}, a_{23}x_1 + a_{13}, a_{34}x_2 + a_{24}x_1 + a_{14}, \dots, \sum_{i=1}^{n-2} a_{i,i+1}x_i + a_{1n}].$$

В роботі [3] побудоване точне зображення групи P_n унітрикутними матрицями $\pi_n: P_n \rightarrow UT(m, p)$, де $m = p^{n-1} + 1$. Крім того для довільного точного зображення $\pi: P_n \rightarrow UT(m, p)$ має місце нерівність $m \geq p^{n-1} + 1$.

Теорема 3. Алгебра Лі L_n занурюється в $T(m, p)$, де $m = p^{n-1} + 1$. Крім того, для довільного точного зображення $\pi: L_n \rightarrow T(m, p)$ має місце нерівність $m \geq p^{n-1} + 1$.

Доведення. Оскільки $\pi_n(P_n) < UT(m, p)$, то звідси маємо

$$L_n = L(P_n) = L(\pi_n(P_n)) < L(UT(m, p)) = T(m, p), \text{ де } m = p^{n-1} + 1.$$

Оскільки алгебра Лі L_n – нільпотентна класу p^{n-1} , а алгебра Лі $T(m, p)$ – нільпотентна класу $m-1$, то для довільного точного зображення $\pi: L_n \rightarrow T(m, p)$ має місце нерівність $m \geq p^{n-1} + 1$. $\square$

3. Висновки.

З результатів роботи випливає, що для унітрикутних груп над полем з p -елементів дві різні конструкції алгебр Лі (одне походить з класичної теорії алгебр Лі, а друге – з теорії нільпотентно апроксимованих груп) дають один і той же результат. Насправді цей факт без змін залишається правильним для довільних скінченних полів. Побудоване занурення алгебри $T(m, p)$ в алгебру L_n показує, що будову і властивості цих алгебр можна вивчати в подібних термінах. Зокрема, аналогом паралелотопічних

підалгебр в L_n є "східцеві" підалгебри $T(m, p)$, що визначаються так само, як і "східцеві" підгрупи групи $UT(n, p)$.

Література

1. Калужнин Л.А. Избранные главы теории групп. – Киев, Изд-во КГУ, 1979, 32 с.
2. Каргаполов М.И., Мерзляков Ю.М. Основы теории групп. – Москва, «Наука», 1977, 237 с.
3. Леонов Ю.Г., Некрашевич В.В., Сущанський В.І. Зображення вінцевих добутків унітрикутними матрицями. – Доповіді НАН України, 2005, № 4, с. 29-33.
4. Магнус В., Каррас А., Солитер Д. Комбинаторная теория групп. – Москва, «Наука», 1974.
5. Супруненко Д.А. Группы матриц. – Москва, «Наука», 1972, 325 с.
6. Сущанський В.І., Сікора В.С. Операції на групах підстановок. Теорія та застосування. – Чернівці, «Рута», 2003, 256 с.
7. Sushchansky V.I., Netreba N.V. Wreath product of Lie algebras and Lie algebras associated with Sylow p -subgroups of finite symmetric groups. – Algebra and Discrete Mathematics, 2005, №1, pp. 122-132.
8. Huppert B., Blackburn N. Finite groups. – v.2, Berlin etc., Springer, 1982.
9. Vaughan M. Lie Methods in group Theory. – Group St. Andrews 2001 in Oxford, v. II, Camb. Univ. press, 2003, pp. 547-585.

Надійшла до редакції 28.12.2005

УДК 519.21

Володимир І. Масол*,
Світлана В. Поперешняк*

**Про швидкість зближення
розподілу рангу випадкової
розрідженої булевої матриці до
розподілу Пуассона**

У статті знайдені оцінки швидкості зближення розподілів, вказаних в назві роботи, за умови, що елементи матриці незалежні та не обов'язково однаково розподілені величини, а відношення числа рядків до числа стовпців цієї ж матриці може повільно прямувати до одиниці.

Ключові слова: випадкова булева матриця, ранг матриці, швидкість зближення розподілів.

Volodymyr I. Masol*,
Svitlana V. Popereshnyak*

**On the rate of convergence of
the distribution of the rank of a
sparse random Boolean matrix to
Poisson distribution**

In this paper estimations of rate of convergence of distributions, which in the name of article, provided that elements of a matrix are independent and not necessarily identically distributed magnitudes are found, and the relation of number of rows toward number of columns of this matrix can tends slowly to unit.

Key words: random Boolean matrix, rank of matrix, rate of convergence of distributions.

E-mail: vymasol@ukr.net, Popereshnyak_sv@mail.ru

Вступ

Матриця A над полем $GF(2)$, що складається з двох елементів, називається розрідженою булевою матрицею, якщо ймовірність появи в ній одиниці на позиції з номером (i, j) дорівнює $\frac{1}{n}(\ln n + x_{ij})$, де $|x_{ij}| \leq c$, $c = \text{const}$, $i = \overline{1, T}$, $j = \overline{1, n}$, T/n - число рядків /стовпців/ матриці A .

В роботах [1], [2] різними методами встановлено граничний пуассонівський розподіл рангу $r(A)$ випадкової розрідженої булевої матриці A , коли $T = T(n)$ і $n \rightarrow \infty$. Для скінчених значень параметрів T і n розподіл рангу $r(A)$ може бути представлений через відповідні вирази для факторіальних моментів випадкової величини $r(A)$, що встановлені в [3]. Асимптотика цих моментів при певних умовах, зокрема, $x_{ij} = x_i$, $i = \overline{1, T}$, $j = \overline{1, n}$ $n - T = \text{const}$ при $n \rightarrow \infty$ наведені в ([4], теорема 4).

Питання про швидкість зближення розподілу рангу зазначеної матриці A до розподілу Пуассона з належним чином підібраним параметром до цього часу не розглядалось. Дослідженню цього питання присвячена дана робота.

Підґрунтям для доведення основного результату статті (теорема 1) слугує теорема про швидкість зближення в схемі Пуассона [5, с.67]. Зазначимо також, що на відміну від [1], [2] в даній роботі розглядається

випадкова матриця A , розподіли елементів якої можуть залежати від місць їх (елементів) розташування.

Основний результат

Нехай елементи $T \times n$ матриці $A = \|a_{ij}\|$, $i = \overline{1, T}$, $j = \overline{1, n}$, - незалежні випадкові величини, які набувають значення у полі $GF(2)$ і мають наступний розподіл

$$P\{a_{ij} = 1\} = 1 - P\{a_{ij} = 0\} = \frac{\ln n + x_{ij}}{n}, \quad (1)$$

де

$$|x_{ij}| \leq c, \quad c = \text{const}, \quad i = \overline{1, T}, \quad j = \overline{1, n}. \quad (2)$$

Будемо вважати, що матриця A має принаймні n_0 стовпців так, що для $n \geq n_0$ задання розподілів (1) є коректним.

Позначимо $r(A)$ ранг матриці A і покладемо

$$\lambda = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^T \exp \left\{ -\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} \right\}. \quad (3)$$

Теорема 1. Нехай виконуються умови (1), (2),

$$\frac{T}{n} \leq 1 - \frac{\log_2 \ln n}{(\ln n)^q}, \quad q = \text{const}, \quad 0 < q < 1, \quad (4)$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{T}{n} > 0. \quad (5)$$

Тоді для k , $k=0, 1, 2, \dots$,

$$\left| P\{r(A) = T - k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2(1 + \delta) c(n, k) \frac{\ln^4 n}{n(\ln \ln n)^2},$$

де $1 < \lim_{n \rightarrow \infty} c(n, k) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} c(n, k) \leq e^\delta$, $\delta > 0$, $\delta = \text{const}$.

Зауваження. Явний вигляд коефіцієнта $c(n, k)$ дає рівність (39).

Допоміжні твердження

Позначимо $\xi_{n,T}$ число нульових рядків матриці A .

Лема 1. При виконанні умов (1) та (2) для розподілу випадкової величини $\xi_{n,T}$ справджується нерівність

$$\left| P\{\xi_{n,T} = k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq Q(n, k), \quad (6)$$

де $Q(n, k) = \frac{\ln^2 n}{n} c_1(n, k)$ і $0 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \lim_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq e^{-1}$ при $k=0$,

$$0 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \frac{k^k}{k!} e^{-k} \max(k, e^e) \text{ при } k \geq 1.$$

Доведення. Ймовірність $p_n^{(i)}$ того, що i -тий рядок матриці A складається повністю з нулів, дорівнює, очевидно,

$$p_n^{(i)} = \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{\ln n + x_{ij}}{n} \right), \quad i = \overline{1, T}.$$

Покладемо $a = p_n^{(1)} + p_n^{(2)} + \dots + p_n^{(n)}$.

Згідно з теоремою Пуассона [5, с. 67] маємо

$$\left| P\{\xi_{n,T} = k\} - \frac{e^{-a} \cdot a^k}{k!} \right| \leq \sum_{i=1}^T (p_n^{(i)})^2. \quad (7)$$

Застосовуючи нерівність $p_n^{(i)} \leq \frac{1}{n} \exp\left\{-\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij}\right\}$ у правій частині (7),

знаходимо

$$\left| P\{\xi_{n,T} = k\} - \frac{e^{-a} \cdot a^k}{k!} \right| \leq \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^T \exp\left\{-\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n p_{ij}\right\}. \quad (8)$$

Оскільки

$$\lambda(1 - \gamma_n) \leq a \leq \lambda, \quad (9)$$

де $\gamma_n = \left(\frac{\ln^2 n}{2n}\right) \frac{(1 - c(\ln n)^{-1})^2}{1 - (\ln n - c)n^{-1}}$ (при обґрунтуванні (9) були використанні нерівності

$$-u - \frac{u^2}{2(1-u)} \leq \ln(1-u) \leq -u \text{ при } |u| < 1, \quad (10)$$

$$\prod_{i=1}^n (1 - x_i) \geq 1 - \sum_{i=1}^n x_i, \quad 0 \leq x_i \leq 1, \quad i = \overline{1, n}, \quad (11)$$

то з урахуванням оцінки

$$e^y \leq 1 + y \left(1 + \frac{y}{2} e^y \right) \text{ для } y \geq 0, \quad (12)$$

маємо

$$-\lambda^{k+1} e^{-\lambda} \gamma_n \left(1 + \frac{\lambda \gamma_n}{2} e^{\lambda \gamma_n} \right) \leq \lambda^k e^{-\lambda} - a^k e^{-a} \leq \lambda^k e^{-\lambda} k \gamma_n.$$

Звідси

$$\left| \lambda^k e^{-\lambda} - a^k e^{-a} \right| \leq \lambda^k e^{-\lambda} \gamma_n \max \left\{ k, \lambda \left(1 + \frac{\lambda \gamma_n}{2} e^{\lambda \gamma_n} \right) \right\}. \quad (13)$$

Поєднання співвідношень (8) та (13) приводить до

$$\left| P\{\xi_{n,T} = k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq$$

$$\leq \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^r \exp \left\{ -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n p_{ij} \right\} + \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!} \gamma_n \max \left\{ k, \lambda \left(1 + \frac{\lambda \gamma_n}{2} e^{\lambda \gamma_n} \right) \right\},$$

або

$$\left| P\{\xi_{n,r} = k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq Q(n, k),$$

де

$$Q(n, k) = \frac{\ln^2 n}{n} c_1(n, k), \quad (14)$$

$$c_1(n, k) = \frac{1}{n \ln^2 n} \sum_{i=1}^r \exp \left\{ -\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n p_{ij} \right\} + \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{2k!} \frac{(1 - c(\ln n)^{-1})^2}{1 - (\ln n - c)n^{-1}} \max \left\{ k, \lambda \left(1 + \frac{\lambda \gamma_n}{2} e^{\lambda \gamma_n} \right) \right\},$$

$$0 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq e^{-1} \text{ при } k=0,$$

$$0 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_1(n, k) \leq \frac{k^k}{k!} e^{-k} \max(k, e^c) \text{ при } k \geq 1.$$

Лему 1 доведено.

Позначимо $S_1(A)$ максимальне число незалежних критичних наборів матриці A (див. [2, с. 147]), кожен з яких містить хоча б один ненульовий рядок.

Лема 2. При виконанні умови (1) математичне сподівання випадкової величини $S_1(A)$ дорівнює

$$MS_1(A) = \sum_{k=0}^r \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq r} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^n \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n} \right) \right) - \sum_{k=0}^r \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq r} \prod_{s=1}^k \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{\ln n + x_{i_s j}}{n} \right).$$

Доведення. Скористаємось тим, що ймовірність того, що кількість успіхів в k незалежних випробуваннях з ймовірністю успіху p_i , $i = \overline{1, k}$, є парним числом, дорівнює

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \prod_{i=1}^k (1 - 2p_i).$$

(Переконалися у цьому неважко, використовуючи метод повної математичної індукції за параметром $k \geq 1$.)

Отже, для ймовірності того, що k рядків утворюють критичний набір маємо вираз

$$\frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^n \left(1 + \prod_{i=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{ij})}{n} \right) \right),$$

Зазначимо, що ймовірність того, що в k рядках немає жодної одиниці, дорівнює

$$\prod_{i=1}^k \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{\ln n + x_{ij}}{n}\right).$$

Звідси неважко завершити доведення леми 2.

Покладемо $f(n) = (\ln \ln n)^{-1} (1 + \delta_1) \ln n$, $\delta_1 = \text{const}$, $\delta_1 > 0$,

$$\mu(n) = \sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \exp \left\{ - \sum_{s=1}^k \sum_{j=1}^n \frac{\ln n + x_{s,j}}{n} \right\}.$$

Лема 3. Якщо виконуються умови (1), (2), (5) та $T \leq n$, (15)

то має місце

$$1 < \lim_{n \rightarrow \infty} \mu(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \mu(n) \leq e^{e^{\delta_1}}. \quad (16)$$

Доведення. Дамо оцінку для $\mu(n)$ зверху. Суму $\mu(n)$ можна подати в наступному вигляді:

$$\mu(n) = \theta_1(n) - \theta_2(n), \quad (17)$$

де

$$\begin{aligned} \theta_1(n) &= \sum_{k=0}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \exp \left\{ - \sum_{s=1}^k \sum_{j=1}^n \frac{\ln n + x_{s,j}}{n} \right\}, \\ \theta_2(n) &= \sum_{k=f(n)+1}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \exp \left\{ - \sum_{s=1}^k \sum_{j=1}^n \frac{\ln n + x_{s,j}}{n} \right\}. \end{aligned}$$

Введемо позначення $a_i = \frac{1}{n} \exp \left\{ - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} \right\}$, $i = \overline{1, T}$. Тоді для $\theta_1(n)$

знаходимо

$$\theta_1(n) = \sum_{k=0}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{s=1}^k \frac{1}{n} \exp \left\{ - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n x_{s,j} \right\} = \sum_{k=0}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{s=1}^k a_{i_s} = \prod_{i=1}^T (1 + a_i). \quad (18)$$

Із (18) випливає з урахуванням (3)

$$\theta_1(n) \leq e^{\lambda}. \quad (19)$$

Оскільки $\theta_2(n) \geq 0$, то (17) та (19) дають співвідношення

$$\mu(n) \leq e^{\lambda}. \quad (20)$$

Оцінимо $\mu(n)$ знизу.

$$\theta_1(n) = \prod_{i=1}^T (1 + a_i) \geq \exp \left\{ \sum_{i=1}^T a_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^T a_i^2 \right\} = e^{\lambda} \exp \left\{ - \frac{1}{2n^2} \sum_{i=1}^T \exp \left(- \frac{2}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} \right) \right\}.$$

Отже

$$\mu(n) \geq e^{\lambda} \exp \left\{ - \frac{1}{2n^2} \sum_{i=1}^T \exp \left(- \frac{2}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij} \right) \right\} - \theta_2(n).$$

З останньої нерівності та (20) випливає

$$e^{\lambda} \exp\left\{-\frac{1}{2n^2} \sum_{i=1}^T \exp\left(-\frac{2}{n} \sum_{j=1}^n x_{ij}\right)\right\} - \theta_2(n) \leq \mu(n) \leq e^{\lambda}. \quad (21)$$

Для $\theta_2(n)$ знаходимо, враховуючи умову (2), що

$$\theta_2(n) = \sum_{k=f(n)+1}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{s=1}^k a_{i_s} \leq \sum_{k=f(n)+1}^T \left(\frac{T \cdot \text{const}}{n}\right)^k \frac{1}{k!},$$

звідси, приймаючи до уваги (15),

$$\theta_2(n) \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (22)$$

В нерівності (21) переходимо до границі при $n \rightarrow \infty$ і в силу (22) та умов (2), (5) та (15) отримуємо (16).

Лемі 3 доведено.

Покладемо $\Gamma(n) = u \left(1 + \frac{u(1+\delta_1)}{2} e^{u(1+\delta_1)}\right)$, $u = \frac{\ln^4 n}{n(\ln \ln n)^2}$.

Лема 4. Якщо виконуються умови (1), (2), то має місце нерівність

$$\sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^n \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)\right) \leq \mu(n) + \mu(n)(1+\delta)\Gamma(n). \quad (23)$$

Доведення. Ліву частину співвідношення (23) оцінимо наступним чином, застосовуючи послідовно нерівності

$$1 - y \leq e^{-y}, \quad y \in (-\infty, \infty), \quad (24)$$

$$\exp\left\{-\sum_{s=1}^k y_s\right\} \leq 1 - \sum_{s=1}^k y_s + \frac{1}{2} \left(\sum_{s=1}^k y_s\right)^2 \text{ для } \sum_{s=1}^k y_s \geq 0,$$

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^n \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)\right) &\leq \\ &\leq \sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{j=1}^n \left(1 - \sum_{s=1}^k \frac{(\ln n + x_{i_s j})}{n} + \left(\sum_{s=1}^k \frac{(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)^2\right). \end{aligned}$$

З останньої нерівності за допомогою (2) та (24) приходимо до

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^n \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)\right) &\leq \\ &\leq \mu(n) \cdot \exp\left\{\frac{f^2(n)(\ln n + c)^2}{n}\right\}. \end{aligned} \quad (25)$$

Далі, використовуючи нерівність (12), отримуємо

$$\exp\left\{\frac{f^2(n)(\ln n + c)^2}{n}\right\} \leq 1 + u(1+\delta) \left(1 + \frac{u}{2}(1+\delta) \cdot \exp\{u(1+\delta)\}\right). \quad (26)$$

З співвідношень (25) і (26) випливає, очевидно, (23).

Лемі 4 доведено.

Лема 5. Якщо виконуються умови (1), (2), (5) та (15), то має місце нерівність

$$\sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{j=1}^k \left(1 - \frac{\ln n + x_{i_j}}{n} \right) \geq \mu(n) - c_2(n) \frac{\ln^3 n}{n \cdot \ln \ln n},$$

$$\text{де } \frac{(1+\delta_1)}{2} < \liminf_{n \rightarrow \infty} c_2(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_2(n) \leq \frac{e^e}{2} (1+\delta_1).$$

Доведення. За допомогою оцінки (10) та співвідношення (2) знаходимо

$$\sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{j=1}^k \left(1 - \frac{\ln n + x_{i_j}}{n} \right) \geq \mu(n) \cdot \exp \left\{ - \frac{f(n)}{2n} (\ln n + c)^2 \cdot \frac{1}{1 - \frac{\ln n + c}{n}} \right\}.$$

Звідси, в силу нерівності (24) та раніше уведеними позначеннями, маємо

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{f(n)} \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{j=1}^k \left(1 - \frac{\ln n + x_{i_j}}{n} \right) &\geq \mu(n) \left(1 - \left[\frac{f(n)}{2n} (\ln n + c)^2 \cdot \frac{1}{1 - \frac{\ln n + c}{n}} \right] \right) \geq \\ &\geq \mu(n) - c_2(n) \cdot \frac{\ln^3 n}{n \cdot \ln \ln n}, \end{aligned}$$

де

$$c_2(n) = \frac{\mu(n)}{2} (1+\delta_1) \left(1 + \frac{c}{\ln n} \right)^2 \frac{1}{1 - \frac{\ln n + c}{n}}$$

$$\text{і при } n \rightarrow \infty \text{ з урахуванням (16) отримуємо} \\ \frac{(1+\delta_1)}{2} < \liminf_{n \rightarrow \infty} c_2(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_2(n) \leq \frac{1}{2} e^e (1+\delta_1).$$

Лемі 5 доведено.

Лема 6. Якщо виконуються умови (1), (2), (5) та (15), то має місце нерівність

$$\begin{aligned} \sum_{\frac{n}{2} \left(1 - \frac{1}{\ln n} \right) \leq k \leq \frac{n}{2} \left(1 + \frac{1}{\ln n} \right)} \binom{n}{k} \frac{1}{2^n} \sum_{l=f(n)}^T \binom{T}{l} \left(\left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^k \right)^l &\leq \\ &\leq \left(\frac{c_3(n)}{f(n)} \right)^{f(n)} \cdot \frac{1}{\sqrt{f(n)}} \cdot c_4(n), \end{aligned}$$

$$\text{де } 0 < \liminf_{n \rightarrow \infty} c_3(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_3(n) \leq e^{2+e}, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} c_4(n) = (2\pi)^{-1/2}.$$

Доведення. Для $\left(\frac{n}{2} \right) \left(1 - \frac{1}{\ln n} \right) \leq k \leq \left(\frac{n}{2} \right) \left(1 + \frac{1}{\ln n} \right)$ знаходимо

$$\left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n}\right)^k \leq e^{-2k(\ln n - c)/n} \leq \frac{1}{n} e^{c+1-\frac{c}{\ln n}}.$$

Тепер, використовуючи отриману оцінку, приходимо до

$$\begin{aligned} \sum_{k=\frac{n}{2}\left(1-\frac{1}{\ln n}\right) \leq k \leq \frac{n}{2}\left(1+\frac{1}{\ln n}\right)} \binom{n}{k} \frac{1}{2^n} \sum_{l=f(n)}^T \binom{T}{l} \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n}\right)^k &\leq \\ \sum_{k=\frac{n}{2}\left(1-\frac{1}{\ln n}\right) \leq k \leq \frac{n}{2}\left(1+\frac{1}{\ln n}\right)} \binom{n}{k} \frac{1}{2^n} \sum_{l=f(n)}^T \binom{T}{l} \left(\frac{1}{n} e^{c+1-\frac{c}{\ln n}}\right)^l &\leq \\ \sum_{l=f(n)}^T \left(\frac{T}{n}\right)^l \frac{e^{c+1-\frac{c}{\ln n}}}{l!} &\leq \end{aligned}$$

Застосовуючи формулу Стірлінга, маємо

$$\sum_{l=f(n)}^T \left(\frac{T}{n}\right)^l \frac{e^{c+1-\frac{c}{\ln n}}}{l!} \leq \left(\frac{c_3(n)}{f(n)}\right)^{f(n)} \cdot \frac{1}{\sqrt{f(n)}} \cdot c_4(n),$$

де $c_3(n) = \frac{T}{n} \cdot e^{2+c-\frac{c}{\ln n}}$, $c_4(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \left(1 - \frac{c_3(n)}{f(n)}\right)^{-1}$ і з урахуванням (5) та (15)

$$0 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_3(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_3(n) \leq e^{2+c}, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} c_4(n) = (2\pi)^{-1/2}.$$

Лему 6 доведено.

Лема 7. Якщо виконуються умови (1), (2), (4) та (5), то має місце нерівність

$$\begin{aligned} \sum_{k=f(n)+1}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^k \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)\right) &\leq c_5(n) \cdot (\ln n)^{\frac{n-c_6(n)}{(\ln n)^q}} + \\ &+ \left(\frac{c_3(n)}{f(n)}\right)^{f(n)} \cdot \frac{1}{\sqrt{f(n)}} \cdot c_4(n) + c_7(n) \cdot \exp\left\{-\frac{n}{2\ln^2 n} c_8(n)\right\}, \end{aligned}$$

де $\lim_{n \rightarrow \infty} c_5(n) = (2\pi)^{-1/2}$, $\lim_{n \rightarrow \infty} c_6(n) = 1 - q$, $\lim_{n \rightarrow \infty} c_8(n) = 1$,

$$\sqrt{\frac{2}{\pi}} < \lim_{n \rightarrow \infty} c_7(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_7(n) \leq \frac{e^{c+1} + e^{c-1}}{\sqrt{2\pi}}.$$

$$\text{Доведення. Позначимо } S = \sum_{k=f(n)+1}^T \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^k \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n}\right)\right).$$

За допомогою умови (2) знаходимо для $n \geq n_0$, що

$$0 \leq S \leq \sigma,$$

де
$$\sigma = \sum_{k=f(n)}^T \binom{T}{k} \frac{1}{2^n} \left(1 + \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^k \right)^n.$$

Для суми σ елементарними перетвореннями отримаємо представлення

$$\sigma = \sum_{k=0}^n A_k(f(n)),$$

де
$$A_k(f(n)) = \binom{n}{k} \frac{1}{2^n} \sum_{l=f(n)}^T \binom{T}{l} \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^{kl},$$

користуючись яким маємо, очевидно, нерівність

$$\sigma \leq S_1 + S_2 + S_3 + S_4,$$

де $S_1 = \sum_{0 \leq k \leq k_1} A_k(0)$, $S_2 = \sum_{k_1 < k \leq k_2} A_k(0)$, $S_3 = \sum_{k_2 < k \leq k_3} A_k(f(n))$, $S_4 = \sum_{k_3 < k \leq n} A_k(0)$,

$$k_1 = \left\lfloor \frac{n}{(\ln n)^q} \right\rfloor, \quad k_2 = \left\lfloor \frac{n}{2} \left(1 - \frac{1}{\ln n} \right) \right\rfloor, \quad k_3 = \left\lfloor \frac{n}{2} \left(1 + \frac{1}{\ln n} \right) \right\rfloor.$$

Перейдемо до оцінки суми S_1 . Маємо

$$S_1 \leq (1 + k_1) \cdot 2^{T-n} \cdot \frac{n^{k_1}}{k_1!}.$$

Звідси, за допомогою формули Стірлінга та (4) приходимо до співвідношення

$$S_1 \leq c_5(n) \cdot (\ln n)^{\frac{-n + c_5(n)}{(\ln n)^q}}, \quad (27)$$

де $c_5(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot (1 + k_1^{-1})$,

$$c_6(n) = 1 - q - \frac{1}{\ln \ln n} \left(1 - \ln \left(1 - \frac{(\ln n)^q}{n} \right) \right) + \frac{1}{2n} (\ln n)^{1+q} - \frac{q(\ln n)^q \ln \ln n}{2n},$$

і $\lim_{n \rightarrow \infty} c_5(n) = (2\pi)^{-1/2}$, $\lim_{n \rightarrow \infty} c_6(n) = 1 - q$.

Перейдемо до оцінки суми S_2 .

Покажемо, що $A_k(0)$ - неспадна функція за параметром k для значень k в області $k_1 < k \leq k_2$. Дійсно,

$$\begin{aligned} \frac{A_{k+1}(0)}{A_k(0)} &= \frac{\binom{n}{k+1} \left(1 + \left(1 - 2 \frac{\ln n - c}{n} \right)^{k+1} \right)^T}{\binom{n}{k} \left(1 + \left(1 - 2 \frac{\ln n - c}{n} \right)^k \right)^T} = \frac{n-k}{k+1} \left(\frac{1 + \left(1 - 2 \frac{\ln n - c}{n} \right)^{k+1}}{1 + \left(1 - 2 \frac{\ln n - c}{n} \right)^k} \right)^T \geq \\ &\geq \frac{1 + 1/\ln n}{1 - 1/\ln n + 2/n} \left(1 - 2 \left(1 - 2 \frac{\ln n - c}{n} \right)^k \cdot \frac{\ln n - c}{n} \right)^T \geq \end{aligned}$$

$$\geq \frac{1+1/\ln n}{1-1/\ln n+2/n} \left(1 - 2 \cdot \frac{\ln n - c}{n} \cdot \frac{1}{n^{2/(\ln n)^q}} \cdot \exp \left\{ \frac{2c}{(\ln n)^q} \right\} \right)^T. \quad (28)$$

Далі, використовуючи (28), (11) та нерівність $T \leq n$, знаходимо

$$\begin{aligned} \frac{A_{k+1}(0)}{A_k(0)} &\geq \frac{1+1/\ln n}{1-1/\ln n+2/n} \left(1 - 2 \cdot \frac{\ln n - c}{n^{2/(\ln n)^q}} \cdot \exp \left\{ \frac{2c}{(\ln n)^q} \right\} \right) \geq \\ &\geq \left(1 + \frac{1}{\ln n} \right) \left(1 - 2 \cdot \frac{\exp \{2c/(\ln n)^q\}}{\exp \{2(\ln n)^{1-q} - \ln \ln n\}} \right). \end{aligned}$$

Звідси

$$\frac{A_{k+1}(0)}{A_k(0)} \geq 1 + \frac{1}{\ln n} \left(1 - \frac{2 \exp \{2c/(\ln n)^q\}}{\exp \{2(\ln n)^{1-q} - 2 \ln \ln n\}} - \frac{2 \exp \{2c/(\ln n)^q\}}{\exp \{2(\ln n)^{1-q} - \ln \ln n\}} \right).$$

Отже $A_k(0)$ - неспадна функція за параметром k в області $k_1 < k \leq k_2$.

Тепер оцінка для S_2 , з урахуванням того, що $A_k(0)$ - неспадна функція за параметром k в області $k_1 < k \leq k_2$, набуває вигляду

$$S_2 \leq \frac{n}{2} A_{k_2}(0) = \frac{n}{2} \binom{n}{k_2} \frac{1}{2^n} \theta_3(n),$$

$$\text{де } \theta_3(n) = \left(1 + \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^{k_2} \right)^T.$$

Очевидно, що $\theta_3(n)$ задовольняє нерівність

$$\theta_3(n) \leq \left(1 + \exp \left\{ -\frac{2k_2(\ln n - c)}{n} \right\} \right)^T \leq \left(1 + \frac{1}{n} e^{c+1 - \frac{c}{\ln n} + 2 \frac{\ln n - c}{n}} \right)^T \leq c_9(n), \quad (29)$$

$$\text{де } c_9(n) = \exp \left\{ \frac{T}{n} e^{c+1 - \frac{c}{\ln n} + 2 \frac{\ln n - c}{n}} \right\}.$$

Для оцінювання $\binom{n}{k_2}$ скористаємось нерівністю

$$\binom{n}{\frac{n}{2} - \psi_n} \leq \frac{2^n \cdot \sqrt{2}}{\sqrt{\pi n \left(1 - \frac{4\psi_n^2}{n^2} \right)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{2\psi_n^2}{n} + \frac{2\psi_n^3}{n^2} + \frac{4\psi_n^4}{n^3} \right\}, \quad (30)$$

де $\frac{\psi_n}{n} \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Тоді отримуємо

$$S_2 \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(1 - \frac{1}{\ln^2 n} \right)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{n}{2\ln^2 n} \left(1 - \frac{1}{2\ln n} - \frac{1}{2\ln^2 n} - \frac{\ln^3 n}{n} \right) \right\} \cdot c_9(n) \quad (31)$$

і з урахуванням умови (5) і співвідношення (15), яке безпосередньо випливає з (4), $1 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_9(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_9(n) \leq e^{1+c}$.

Для суми S_4 , маємо

$$S_4 \leq \frac{n}{2} A_{k_3}(0) = \frac{n}{2} \binom{n}{k_3} \frac{1}{2^n} \left(1 + \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^{k_3} \right)^T.$$

Аналогічно (29) знаходимо, що

$$\left(1 + \left(1 - \frac{2(\ln n - c)}{n} \right)^{k_3} \right)^T \leq \left(1 + \frac{1}{n} e^{e^{-1+\frac{c}{\ln n}}} \right)^T \leq c_{10}(n), \quad (32)$$

де $c_{10}(n) = \exp \left\{ \frac{T}{n} e^{e^{-1+\frac{c}{\ln n}}} \right\}$.

За допомогою (30) та (32) приходимо до нерівності

$$S_4 \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(1 - \frac{1}{\ln^2 n} \right)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{n}{2 \ln^2 n} \left(1 - \frac{1}{2 \ln n} - \frac{1}{2 \ln^2 n} - \frac{\ln^3 n}{n} \right) \right\} \cdot c_{10}(n), \quad (33)$$

і з урахуванням умов (5) та (15)

$$1 < \lim_{n \rightarrow \infty} c_{10}(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_{10}(n) \leq e^{e^{-1}}.$$

Із (31) та (33) випливає

$$S_2 + S_4 \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(1 - \frac{1}{\ln^2 n} \right)}} \cdot \exp \left\{ -\frac{n}{2 \ln^2 n} \left(1 - \frac{1}{2 \ln n} - \frac{1}{2 \ln^2 n} - \frac{\ln^3 n}{n} \right) \right\} \times \\ \times (c_9(n) + c_{10}(n)) \leq c_7(n) \cdot \exp \left\{ -\frac{n}{2 \ln^2 n} c_8(n) \right\}, \quad (34)$$

де

$$c_8(n) = \left(1 - \frac{1}{2 \ln n} - \frac{1}{2 \ln^2 n} - \frac{\ln^3 n}{n} \right),$$

$$c_7(n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \left(1 - \frac{1}{\ln^2 n} \right)}} \cdot (c_9(n) + c_{10}(n))$$

$$\text{і } \sqrt{\frac{2}{\pi}} < \lim_{n \rightarrow \infty} c_7(n) \leq \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} c_7(n) \leq \frac{e^{e^{-1}} + e^{e^{-1}}}{\sqrt{2\pi}}, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} c_8(n) = 1.$$

Поєднуючи оцінки (27), (34) та оцінку для суми S_3 , знайдену в лемі 6, отримуємо лему 7.

Позначимо $S(A)$ максимальне число незалежних критичних наборів матриці A .

Лема 8. При виконанні умов (1) та (2) для довільного $k, k=0, 1, 2, \dots$, має місце нерівність

$$\left| P\{S(A)=k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2MS_1(A) + Q(n, k),$$

де $MS_1(A)$ знайдено в лемі 2, а $Q(n, k)$ - в лемі 1.

Доведення. Враховуючи лему 1, маємо

$$\begin{aligned} \left| P\{S(A)=k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| &\leq \left| P\{S(A)=k\} - P\{\xi_{n,r}(A)=k\} \right| + Q(n, k) = \\ &= \left| P\{S_1(A) + \xi_{n,r}(A)=k\} - P\{\xi_{n,r}(A)=k\} \right| + Q(n, k). \end{aligned}$$

Застосовуючи співвідношення

$$P\{S_1(A) + \xi_{n,r}(A)=k\} = \sum_{l=0}^k P\{S_1(A)=l, \xi_{n,r}(A)=k-l\},$$

$$\left| P\{S_1(A)=0, \xi_{n,r}(A)=k\} - P\{\xi_{n,r}(A)=k\} \right| \leq P\{S_1(A) \geq 1\}$$

та нерівність Чебишева, знаходимо

$$\left| P\{S(A)=k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2P\{S_1(A) \geq 1\} + Q(n, k) \leq 2MS_1(A) + Q(n, k).$$

Лему 8 доведено.

Доведення теореми 1

Дамо оцінку для $MS_1(A)$. З цією метою позначимо для $k \geq 0$

$$\Delta_1(k) = \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \frac{1}{2^n} \prod_{j=1}^k \left(1 + \prod_{s=1}^k \left(1 - \frac{2(\ln n + x_{i_s j})}{n} \right) \right),$$

$$\Delta_2(k) = \sum_{1 \leq i_1 < \dots < i_k \leq T} \prod_{s=1}^k \prod_{j=1}^n \left(1 - \frac{\ln n + x_{i_s j}}{n} \right)$$

і за допомогою лем 2 представимо $MS_1(A)$ у вигляді

$$MS_1(A) = \sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_1(k) + \sum_{k=f(n)+1}^T \Delta_1(k) - \left(\sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_2(k) + \sum_{k=f(n)+1}^T \Delta_2(k) \right).$$

(Звідси

$$MS_1(A) \leq \sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_1(k) + \sum_{k=f(n)+1}^T \Delta_1(k) - \sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_2(k).$$

В силу лем 4 та 5 знаходимо

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_1(k) - \sum_{k=0}^{f(n)} \Delta_2(k) &\leq \mu(n) + \mu(n)(1+\delta)\Gamma(n) - \left(\mu(n) - c_2(n) \frac{\ln^3 n}{n \cdot \ln \ln n} \right) = \\ &= \mu(n)(1+\delta)\Gamma(n) + c_2(n) \frac{\ln^3 n}{n \cdot \ln \ln n}. \end{aligned} \quad (35)$$

Поєднуючи (35) з оцінкою суми $\sum_{k=f(n)+1}^T A(k)$, отриманою в лемі 7, маємо

$$MS_1(A) \leq \mu(n)(1+\delta)\Gamma(n) + F(n), \quad (36)$$

де

$$F(n) = c_2(n) \frac{\ln^3 n}{n \cdot \ln \ln n} + c_3(n) \cdot (\ln n)^{\frac{n \cdot c_6(n)}{(\ln n)^q}} + \\ + \left(\frac{c_3(n)}{f(n)} \right)^{f(n)} \cdot \frac{1}{\sqrt{f(n)}} \cdot c_4(n) + c_7(n) \cdot \exp \left\{ -\frac{n}{2 \ln^2 n} c_3(n) \right\}. \quad (37)$$

Згідно (36) та лемі 8

$$\left| P\{S(A) = k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2 \left[\mu(n)(1+\delta)\Gamma(n) + F(n) \right] + Q(n, k).$$

Скориставшись явним виглядом $\Gamma(n)$, запишемо

$$\left| P\{S(A) = k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2(1+\delta)c_{11}(n)u + 2F(n) + Q(n, k),$$

де
$$c_{11}(n) = \mu(n) + \mu(n) \frac{u}{2} (1+\delta) \exp\{u(1+\delta)\}, \quad (38)$$

З останньої нерівності та співвідношення $r(A) + s(A) = T$ (див. [2, с.148]) випливає

$$\left| P\{r(A) = T - k\} - \frac{e^{-\lambda} \cdot \lambda^k}{k!} \right| \leq 2(1+\delta)c(n, k) \frac{\ln^4 n}{n(\ln \ln n)^2},$$

де
$$c(n, k) = c_{11}(n) + \frac{F(n)}{(1+\delta)u} + \frac{Q(n, k)}{2u(1+\delta)}, \quad (39)$$

$c_{11}(n)$, $F(n)$ та $Q(n, k)$ визначені відповідно рівностями (38), (37) і (14).

Граничний розподіл рангу випадкової розрідженої булевої матриці

Теорема 2. I. Нехай виконуються умови теореми 1 та

$$\lambda \rightarrow \lambda_0 \text{ при } n \rightarrow \infty \quad (40)$$

Тоді $0 < \lambda_0 < \infty$ і для $k, k=0, 1, 2, \dots$ має місце співвідношення

$$P\{r(A) = T - k\} \rightarrow e^{-\lambda_0} \frac{\lambda_0^k}{k!}, \quad n \rightarrow \infty \quad (41)$$

II. Якщо виконуються умови (1), (2), (4), (40) та $\lambda_0 > 0$, то $\lambda_0 < \infty$ і має місце (41).

З урахуванням теореми 1 доведення теореми 2 не викликає труднощів.

Наслідок. Якщо виконується умова (1), в якій $x_i = x$, $i = \overline{1, T}$, $j = \overline{1, n}$, x - фіксоване число, і при $n \rightarrow \infty$ $\frac{T}{n} \rightarrow \alpha$, де $0 < \alpha < 1$, то має місце співвідношення (41), в якому $\lambda_0 = \alpha e^{-x}$.

Для доведення наслідку достатньо помітити, що умови першої (або другої) частини теореми 2 виконуються тривіальним чином при виконанні умов наслідку.

Зауваження 2. Результат наведеного вище наслідку отримано, зокрема, в ([1], теорема 1) та в ([2], теореми 3.1.1 та 3.3.1).

Висновки

У статті знайдені оцінки швидкості зближення розподілу рангу випадкової розрідженої булевої матриці до розподілу Пуассона (теорема 1). За допомогою теореми 1 отримана теорема 2, яка узагальнює відомий результат про граничний розподіл рангу зазначеної матриці на випадок, коли розподіли її елементів залежать від місць їх (елементів) розташування, а відношення числа рядків до числа стовпців матриці не перевищує $1 - \gamma(n)$, де $\gamma(n)$ повільно прямує до нуля, набуваючи лише додатних значень.

Список літератури

1. Балакин Г.В., Распределение ранга случайных матриц над конечным полем. // Теория вероятностей и её применения. – 1968. – в. XIII, №4. – С. 631-641.
2. Колчин В.Ф., Случайные графы. – М.: Физматлит, 2004. – 256 с.
3. Masol V.I. Moments of the number solutions of system of random Boolean equations// Random Oper. and Stoch. Equations. – 1993. – 1, N 2. – p. 171-179.
4. Masol V.I. Theorems of invariance for systems of random Boolean equations// Sixth Intern. Vilnius Conf. of Probability Theory and Math. Statist.: Abstr. of Communic. – 1993. – p. 19-20.
5. Севастьянов Б.А., Курс теории вероятностей и математической статистики. – М.: Наука, 1982. – 256 с.

Надійшла до друку 15.06.2005 р.

УДК 519.9

Тетяна І. Савочкіна*

Класифікація 3-породжених p -груп, у яких нормалізатори підгруп нормальні та мають доповнення ($p > 2$)

Досліджуються p -групи, у яких нормалізатор кожної підгрупи є нормальною підгрупою і має доповнення.

Ключові слова: нормалізатор, доповнення, комутант

*E-mail: savochkinat@rambler.ru

Групи з нормальними нормалізаторами підгруп (τ -групи) були предметом дослідження у роботах [1] – [7]. Зокрема в [7] встановлено, що для $p > 3$, у кожній p -групі із τ комутант нормалізує кожну підгрупу, а в [2] встановлено, що усяка τ -група має клас нільпотентності ≤ 3 . Групи, у яких нормалізатори (деяких) підгруп мають доповнення вивчались в роботах [8] – [11].

У даній роботі досліджуються скінченні p -групи G ($p > 2$), у яких нормалізатори підгруп нормальні та мають доповнення (τ^* -групи). Відмітимо, що 2-групи G із класу τ^* вивчались у роботі [12].

Нехай G – довільна скінченна p -група ($p > 2$) із τ^* . Встановлено, що у групі G існує твірний елемент порядку p і для всякої підгрупи $H \leq G$ нормалізатор $N_G(H)$ має абелеве доповнення T в G . Крім того, якщо $\exp H = p$, то і $\exp T = p$. Основний результат: одержано повну класифікацію 3-породжених p -груп ($p > 2$) із класу τ^* з точністю до ізоморфізму.

§1. Властивості 2-породжених τ^* -груп.

Позначимо через τ клас всіх груп з нормальними нормалізаторами всіх підгруп.

Лема 1. Нехай група $G = \langle a, b \rangle \in \tau^*$ і G – неабелева p -група; $p > 2$. Якщо $|b| = p$, то $\exp G = p$.

Доведення. Нехай група $G = \langle a, b \rangle$ задовольняє умови леми і елемент $g \in G$. Тоді $1 = [g, b^p] = [g, b]^p \cdot [g, b, b]^{C_p^2} = [g, b]^p$, оскільки $G \in \tau$, а тому $[g, b, b] = 1$. Розглянемо підгрупу $F = N_G(\langle b \rangle)$. Оскільки $b^p = 1$, то $N_G(\langle b \rangle) = C_G(\langle b \rangle)$. Якщо $F = G$, то $[a, b] = 1$ і G – абелева група, що за умовою неможливо; отже $F \neq G$. Далі $[a^p, b] = [a, b]^p \cdot [a, b, a]^{C_p^2} = 1$, а тому $a^p \in F$; отже F – максимальна підгрупа групи G . Оскільки $G \in \tau^*$, то $G = F \lambda \langle t \rangle$, $t^p = 1$. Очевидно, $F = \langle b, a^p, c \rangle$, де $c = [a, b]$, а тому $G = \langle b, a^p, c, t \rangle = \langle b, t \rangle$, оскільки елементи $a^p, c \in \Phi(G)$. Враховуючи, що

Tatyana I. Savochkina*

The classification of 3-generator p -groups at which normalizer of each subgroup is a normal subgroup and has addition ($p > 2$)

P -groups are investigated at which normalizer of each subgroup is a normal subgroup and has addition.

Key Words: normalizer, addition, commutant.

комутатор $[b, t] \in Z(G)$, маємо $G' \leq Z(G)$, отже група $G \in \Delta_2$. Далі, для довільного елемента $f \in G$, маємо $f = b^i \cdot t^j \cdot [b, t]^m$, звідси $f^p = 1$, отже $\exp G = p$. Лему 1 доведено.

Лема 2. Нехай p -група $G \in \tau$, $p > 2$, факторизується двома циклічними нормальними підгрупами. Тоді існують твірні $u, t \in G$, що $G = \langle t \rangle \lambda \langle u \rangle$.

Доведення. Припустимо група G задовольняє умову леми. Якщо $K = \langle a \rangle \cap \langle b \rangle = \{1\}$ і $G = \langle a \rangle \cdot \langle b \rangle$, де $\langle a \rangle, \langle b \rangle$ – нормальні підгрупи в G , то $G = \langle a \rangle \times \langle b \rangle$ і все встановлено. Нехай $K = \langle d \rangle$, $d = a^{\lambda \cdot p^k} = b^{p^l} \neq 1$; $(\lambda, p) = 1$. Оскільки комутант $G' \leq \langle a \rangle \cap \langle b \rangle$, то група $G \in \Delta_2$. Клас нільпотентності групи G менше p , а тому G – регулярна група і тоді маємо рівність $(b \cdot a^{-\lambda \cdot p^{k-l}} \cdot f)^{p^l} = 1$, для деякого елемента $f \in G'$. Нехай $f = a^m$, тоді $(b \cdot a^\gamma)^{p^l} = 1$, для деякого γ . Покладемо $b \cdot a^\gamma = u$, тоді $G = \langle a, u \rangle$ і $|u| = p^l$. Дійсно, припустимо $|u| = p^v$, де $1 \leq v < l$, звідси $1 = u^{p^v} = (b \cdot a^\gamma)^{p^v} = b^{p^v} \cdot a^{\gamma p^v} \cdot f_1$, де $f_1 \in G'$. Нехай $f_1 = a^\delta$, тоді $1 = b^{p^v} \cdot a^{\gamma p^v + \delta}$, звідси $b^{p^v} \in \langle a \rangle$, що суперечить умові $K = \langle b^{p^l} \rangle$. Таким чином встановлено, що $|u| = p^l$.

Покажемо, що $\langle u \rangle \cap \langle a \rangle = \{1\}$. Нехай $1 \neq u^{p^n} \in \langle a \rangle$, тоді $n < l$. Маємо $u^{p^n} = (b \cdot a^\gamma)^{p^n} = b^{p^n} \cdot a^{\gamma p^n} \cdot f_2$, де $f_2 = a^\sigma$; звідси $b^{p^n} \in \langle a \rangle$, що неможливо. Покладемо $t = a$, тоді $G = \langle t \rangle \lambda \langle u \rangle$. Лему 2 доведено.

Лема 3. Нехай p -група $G = \langle a, b \rangle \in \tau^*$ і $p > 2$, тоді група G має центральний комутант, тобто $G \in \Delta_2$.

Доведення. Випадок 1. Для кожного $g \in G \setminus \Phi(G)$, підгрупа $\langle g \rangle \not\leq \Phi(G)$. Покладемо $c = [a, b]$ і нехай елемент $c \notin \langle a^p \rangle \cdot G_3 = K$, де $G_3 = [G, G, G]$. Розглянемо підгрупу $H = \langle a, c^p, G_3 \rangle$ і покажемо, що елемент $b \notin M = N_G(H)$. Дійсно, нехай $b \in M$, тоді $c \in H$, а тому $c = c^{\gamma p} \cdot a^{\nu p} \cdot g$, де $g \in G_3$, звідси $c^{1-\gamma p} \in K$, тобто $c^1 \in K$, що за умовою неможливо. Отже доведено $b \notin M$. Очевидно елементи $a, c, b^p \in M$ і $G_3 \leq M$, а тому M – максимальна в G підгрупа. Оскільки $G \in \tau^*$, то $G = M \lambda \langle t \rangle$, $|t| = p$. Крім того $M = \langle a, c, b^p, G' \rangle$, а тому $G = \langle a, t \rangle$.

Аналогічно, у випадку $c \notin \langle b^p \rangle \cdot G_3$, доводимо існування твірної елемент t такого, що $G = \langle b, t \rangle$, $|t| = p$.

Припустимо елемент $c \in \langle a^p \rangle \cdot G_3 \cap \langle b^p \rangle \cdot G_3$, тоді $[a, b, a] = [a, b, b] = 1$, а тому група $G \in \Delta_2$. Отже можна вважати, що $G = \langle u, t \rangle$, де $|t| = p$. У цьому випадку $[u, t]^p = 1$ і $[u^p, t] = 1$. Розглянемо абелеву підгрупу $A = \langle u^p, t \rangle$. Припустимо $w = [u, t] \neq 1$ і покажемо, що $w \notin A$. Нехай $w \in A$, тоді $w = u^{\gamma p} \cdot t^m$, для деяких чисел γ і m . Якщо m не ділиться на p , то $t \in \Phi(G)$, що неможливо. Отже m ділиться на p , а тому $t^m = 1$, звідси

$w = u^{v^p} \in \langle u^p \rangle$, що неможливо, оскільки $\langle u \rangle \ntriangleleft G$. Розглянемо нормалізатор $N_G(A) = N$. Маємо $[u, t, t] = 1$ і $[u^p, [u, t]] = 1$, оскільки $u^p \in Z(G)$. Отже елементи $[u, t]$, t і $u^p \in N$. Крім того, $G_3 \leq N$ і $[u, t] \notin N$. Звідси випливає, що N – максимальна в G підгрупа і $G = N \lambda \langle v \rangle$, де $v^p = 1$. Оскільки $G = \langle t, u^p, v, G' \rangle = \langle t, v \rangle$ і $|t| = |v| = p$, то група $G \in \Delta_2$.

Випадок 2. Припустимо, що існує елемент $a \notin \Phi(G)$ і $\langle a \rangle \triangleleft G$. За умовою $G = \langle a \rangle \cdot \langle b \rangle$, а тому $c = [a, b] = a^{v \cdot p^j}$, де $(v, p) = 1$ і $G' = \langle c \rangle$.

Якщо $[a, b, b] = 1$, то група $G \in \Delta_2$. Припустимо $[a, b, b] \neq 1$, тоді $[a, b, b] = c^{v \cdot p^j} = a^{v^2 \cdot p^{2j}} \neq 1$. Розглянемо підгрупу $D = \langle b, c^p \rangle$. Нехай $c \in D$, тоді $c = b^i \cdot c^{p^j}$, оскільки $\langle c^p \rangle \triangleleft D$. Звідси $c^{1-p^j} = b^i$, а тому $c \in \langle b \rangle$ і $[a, b, b] = 1$, що за умовою неможливо, отже $c \notin D$. Одержали, що елемент $a \notin N = N_G(D)$. З іншого боку, елемент $a^p \in N$, оскільки $[a^p, b] = c^p \in D$. Звідси випливає, що N – максимальна підгрупа в G , а тому $G = N \lambda \langle f \rangle$, де $|f| = p$. Знайдеться елемент $h \in G$ такий, що $G = \langle h, f \rangle$ і $[f, h]^p = 1$. Оскільки $\langle [f, h] \rangle = \langle c \rangle$, то $c^p = 1$, що неможливо. Таким чином виконуються рівності $[a, b, b] = 1$ і $[a, b, a] = 1$, а тому група $G \in \Delta_2$. Лему 3 доведено.

Лема 4. Нехай скінчена неабелева p -група $G \in \tau^*$ і $p > 2$, тоді в G існує твірний елемент порядку p .

Доведення. Нехай група G задовольняє умови леми. Якщо G недедекіндова група, то за теоремою Берковича в G існує така підгрупа A , що нормалізатор $N = N_G(A)$ – максимальна в G підгрупа. Оскільки $G \in \tau^*$, то $G = N \lambda \langle t \rangle$, де $|t| = p$, і все доведено. Якщо G – дедекіндова, то $p = 2$, що за умовою неможливо. Лему 4 доведено.

Теорема 1. Нехай p -група $G = \langle a, b \rangle \in \tau^*$ і $p > 2$. Тоді G є групою одного із наступних типів:

- T1) $G = P_1$ – абелева 2-породжена p -група, $p > 2$;
- T2) $G = P_2 = \langle a, b \rangle$, $a^p = b^p = c^p = 1$, $c = [a, b] \neq 1$, $[c, a] = [c, b] = 1$, $p > 2$, $|G| = p^3$.

Доведення. Необхідність. Розглянемо неабелеву групу $G = \langle a, b \rangle$, яка задовольняє умови теореми. За лемою 3 в G існує твірний елемент порядку p , звідси за лемою 1 $\exp G = p$. Оскільки група $G \in \tau$, то за [5] група G має центральний комутант. Припустимо, що $\langle a \rangle \triangleleft G$. Оскільки $G = \langle a, b \rangle$ і $G = N_G(\langle a \rangle) = C_G(\langle a \rangle)$, то G – абелева група, що за умовою неможливо. Одержали, що для кожного елемента $g \notin \Phi(G)$ підгрупа $\langle g \rangle \ntriangleleft G$. Оскільки $G \in \Delta_2$, то комутант $G' = \langle c \rangle$, де $c = [a, b]$. Таким чином: $a^p = b^p = c^p = 1$, $c = [a, b] \neq 1$, $[c, a] = [c, b] = 1$ і $p > 2$. Одержали групу типу T2).

Достатність. Нехай група $G \cong P_2$. Очевидно елемент $c = [a, b] \in Z(G)$ і $Z(G) = G' = \langle c \rangle$. Дійсно, $\langle c \rangle \triangleleft G$ і $\bar{G} = G/\langle c \rangle = \langle \bar{a}, \bar{b} \rangle$ – абелева група, а тому $G' = \langle c \rangle$ і $|\bar{G}| = p^2$. Звідси випливає, що $|G| = p^3$ і

$G \in \Delta_2$. Оскільки G – регулярна група і G породжується елементами p -го порядку, то $\exp G = p$.

Розглянемо довільну підгрупу $H \neq \{1\}$ із G і нехай $M = N_G(H)$. Оскільки $|M| \in \{p^2, p^3\}$, то звідси $M \triangleleft G$. Нехай M – максимальна в G підгрупа. Тоді a або $b \notin M$, а тому M має доповнення в G . Достатність встановлено. Теорему доведено.

Лема 5. Нехай група $G \in \tau^*$. Тоді комутант нормалізує всяку підгрупу $H \leq G$, тобто нормалізатор $N_G(H)$ має абелеве доповнення в G .

Доведення. Нехай група $G \in \tau^*$. Відомо [2], що група $G \in \Delta_3$. Відмітимо, що якщо для підгрупи $M < G$ маємо $M \cap Z(G) = \{1\}$, то M – абелева підгрупа ([5], лема 2).

Розглянемо довільну підгрупу $H \leq G$, тоді $G = N_G(H) \wedge T$. Оскільки $Z(G) \leq N_G(H)$, то $T \cap Z(G) = \{1\}$, а тому T – абелева підгрупа. Лему 5 доведено.

Лема 6. Нехай G – скінченна p -група із τ^* і $p > 2$. Якщо $\exp H = p$, то доповненням до нормалізатора $N_G(H)$ підгрупи $H \leq G$ є елементарна абелева підгрупа.

Доведення. Нехай $H \leq G \in \tau^*$ і $G = N_G(H) \wedge T$. За лемою 5 T – абелева підгрупа. Якщо $t \in G$ і $t^p = 1$, то для довільного елемента $g \in G$ маємо $[t, g]^p = 1$. Нехай $h \in H$ і $y \in T$, тоді $[h, y]^p = 1$. Далі маємо: $[h, y^p] = [h, y]^p \cdot [h, y, y]^{p \cdot m} = 1$, а тому $y^p \in N_G(H) \cap T = \{1\}$, тобто $\exp T = p$. Лему 6 доведено.

§2. Класифікація p -груп $G = \langle a, b, c \rangle \in \tau^*$, для $p > 2$.

Нехай $G = \langle a, b, c \rangle$ p -група із класу τ^* і $p > 2$. Будемо вважати, що G – неабелева група. За лемою 4 існує твірний елемент t порядку p , а тому $G = F \wedge \langle t \rangle$. Якщо $\langle t \rangle \triangleleft G$, то $G = F \times \langle t \rangle$, де F – неабелева група з двома твірними. Покажемо, що $F \in \tau^*$. Дійсно, клас τ^* замкнений за гомоморфними образами і $F \cong G / \langle t \rangle$, а тому $F \in \tau^*$. Таким чином, F – неабелева група з двома твірними із класу τ^* . За теоремою 1 можна вважати, що $F = \langle a, b \mid a^p = b^p = c^p = 1, 1 \neq c = [a, b], [a, c] = [b, c] = 1 \rangle$. Одержали групу $G_1 = F \times \langle t \rangle$.

Припустимо тепер, що $D = N_G(\langle t \rangle) < G$. За умовою $G = D \wedge M$. За лемою 6 M – елементарна абелева підгрупа.

Випадок 1. M – підгрупа Клейна. Покладемо $M = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $u^p = v^p = 1$. За лемою 1 із [12] комутант $G' = \Phi(G) \leq D$. Покажемо, що $D = \langle t \rangle \times G'$. За умовою можна вважати $G = \langle t, u, v \rangle$, тоді для елемента $d \in D$ маємо $d = f \cdot t^i \cdot u^r \cdot v^s$, де $f \in G'$, звідси $u^r \cdot v^s \in D \cap M = \{1\}$. Одержали $d = f \cdot t^i \in G' \times \langle t \rangle$, тобто $D = G' \times \langle t \rangle$.

Покладемо: $[t, u] = w$, $[t, v] = z$. Якщо $w = 1$, то $u \in D$, що неможливо, тобто $w \neq 1$ і, аналогічно, $z \neq 1$. Оскільки група G породжується елементами порядку $p > 2$, то за лемою 1 із [12] $\exp G = p$.

Припустимо $z \in \langle w \rangle$, тобто $z = w^l$, $0 < l < p$. Оскільки $G \in \Delta_2$, то $[t, v^{-1} \cdot u^l] = w^l \cdot z^{-1} = 1$, отже елемент $v^{-1} \cdot u^l \in D \cap M = \{1\}$, що неможливо. Таким чином, $\langle z, w \rangle = \langle z \rangle \times \langle w \rangle$. Одержали групу

$$G_2 = \langle t, u, v \rangle = (\langle t \rangle \times \langle z \rangle \times \langle w \rangle) \wedge (\langle u \rangle \times \langle v \rangle), \quad t^p = z^p = w^p = u^p = v^p = 1, \quad [t, v] = z, \quad [t, u] = w, \quad w, z \in Z(G_2).$$

Випадок 2. M – підгрупа порядку p . За умовою $G = D \wedge M$, де $M = \langle u \rangle$, $|u| = p$; $D = N_G(\langle t \rangle)$. Тоді $G = \langle t, u, f \rangle$, де $f \in D$; $|f| = p^k$. Оскільки $N_G(\langle t \rangle) = C_G(\langle t \rangle)$, то $\langle f, t \rangle = \langle f \rangle \times \langle t \rangle$ і, очевидно, $[u, t] = w \neq 1$, $w^p = 1$.

Припустимо $k = 1$. Тоді група G породжується елементами порядку p , а тому за лемою 1 із [12] $\Phi(G) = G' \leq Z(G)$. Для довільного елемента $d \in D$ маємо $d = h \cdot f^i \cdot t^j \cdot u^k$, де $h \in G'$, звідси $u^k \in D \cap M = \{1\}$, а тому $d = h \cdot f^i \cdot t^j \in G' \times \langle f \rangle \times \langle t \rangle$. Одержали рівність $D = G' \times \langle f \rangle \times \langle t \rangle$ (якщо комутатор $w = [u, t] = 1$, то елемент $u \in D \cap M = \{1\}$, що неможливо). Отже $w \neq 1$ і $w^p = 1$. Можливі випадки: 2а) $[f, u] = 1$; 2б) $[f, u] = w^i$, $0 < i < p$; 2в) $[f, u] = z \neq 1$, де $\langle z \rangle \cap \langle w \rangle = \{1\}$.

Розглянемо випадок 2а). Нехай $[f, u] = 1$, тоді очевидно $G = \langle f \rangle \times ((\langle t \rangle \times \langle w \rangle) \wedge \langle u \rangle)$. Якщо покласти: $a_1 = t$, $b_1 = u$, $c_1 = w$, $t_1 = f$, то одержимо групу $G \cong G_1$.

Розглянемо випадок 2б). Нехай $[f, u] = w^i$, $0 < i < p$. Для елемента $f_1 = f \cdot t^i$ маємо $[f_1, u] = 1$, а тому маємо групу $G = \langle f_1, u, t \rangle = \langle f_1 \rangle \times ((\langle t \rangle \times \langle w \rangle) \wedge \langle u \rangle) \cong G_1$.

Розглянемо випадок 2в). Нехай $[f, u] = z \neq 1$ і $\langle z \rangle \cap \langle w \rangle = \{1\}$. У цьому випадку одержали групу $G \cong G_2 = \langle u, f, t \rangle = (\langle z \rangle \times \langle w \rangle \times \langle u \rangle) \wedge (\langle f \rangle \times \langle t \rangle)$.

Припустимо $k > 1$. Розглянемо нормалізатор $L = N_G(\langle u \rangle)$. Оскільки $L = C_G(\langle u \rangle)$, то елемент $t \notin L$. За умовою $G \in \tau^*$, а тому $G = L \wedge K$ і за лемою 6 K – елементарна абелева підгрупа, причому $|K| = p$ або p^2 . Якщо $|K| = p^2$, то $K = \langle g_1 \rangle \times \langle g_2 \rangle$ і $G = \langle u, g_1, g_2 \rangle$, а тому за лемою 1 із [12] група G має експоненту p , що неможливо за умовою. Отже $|K| = p$ і $K = \langle g \rangle$. Оскільки $[t, u] \neq 1$, то елемент $t \notin L$, а тому $G = L \wedge \langle t \rangle$, причому можна вважати $G = \langle u, h, t \rangle$, де $u, h \in L$ і $h = f^i$. Дійсно, знайдеться елемент $g \in L$ такий, що $G = \langle u, g, t \rangle$ і $g = f^i \cdot t^j \cdot u^k \cdot d$, де $d \in G'$. Отже $G = \langle u, h, t \rangle$, де $h = f^i \cdot t^j \in L$. Оскільки $[h, u] = 1$ і $[h, t] = [f^i, t] = 1$, то h – центральний твірний елемент, порядку p^k , $k > 1$.

Розглянемо фактор-групу $\bar{G} = G/\langle h \rangle$. Очевидно $\bar{G} = \langle \bar{u}, \bar{t} \rangle$ – 2-породжена p -група із класу τ^* . За описом таких груп (теорема 1) $G \in \{P_1, P_2\}$.

Припустимо $\bar{G} \cong P_1$, тобто $\bar{G}$ – абелева 2-породжена p -група, $p > 2$. У цьому випадку комутатор $[u, t] \in \langle h^{p^{k-1}} \rangle$. Для підгрупи $P = \langle u, t \rangle$

маємо: $[u, t] = h^{\lambda \cdot p^{k-1}} \neq 1$; $(\lambda, p) = 1$; $u^p = t^p = 1$, $\exp P = p$. За теоремою 1 група $P \cong P_2$, причому: $P \cap \langle h \rangle = \langle h^{p^{k-1}} \rangle$, $|P| = p^3$, $|G| = p^{k+2}$. Отже одержали групу $G \cong G_3$, де

$$G_3 = \langle h \rangle \cdot P, \quad h \in Z(G), \quad P = \langle u, t \rangle, \quad u^p = t^p = 1, \quad [u, t] = h^{\lambda \cdot p^{k-1}}, \quad (\lambda, p) = 1, \\ |h| = p^k, \quad |G| = p^{k+2}, \quad |P| = p^3, \quad k > 1.$$

Припустимо тепер $\bar{G} \cong P_2$, тобто $\bar{G}$ – неабелева група експоненти p і порядку p^3 . Розглянемо підгрупу $P = \langle u, t \rangle$. Очевидно: $z = [u, t] \neq 1$, $z^p = 1$, $z \notin \langle h \rangle$. Оскільки $[u, t, u] = [u, t, t] = 1$, то елемент $z \in Z(G)$. Одержали групу $G \cong G_4$, де

$$G_4 = \langle h \rangle \times P, \quad |h| = p^k, \quad k > 1, \quad P = \langle u, t \rangle, \quad u^p = t^p = 1, \quad [u, t] = z, \quad |z| = p, \quad z \in Z(P).$$

Таким чином встановлено, що всяка неабелева p -група $G = \langle a, b, c \rangle \in \tau^*$, для $p > 2$, ізоморфна до однієї із груп G_1, G_2, G_3 або G_4 .

Теорема 2. Для того щоб неабелева p -група G ($p > 2$) з трьома твірними була τ^* -групою необхідно і достатньо, щоб вона була ізоморфна одній із наступних груп:

- 1) $G_1 = F \rtimes \langle t \rangle$, $F = \langle a, b \rangle$, $|a| = |b| = |t| = |c| = p$, $c = [a, b]$, $[c, a] = [c, b] = 1$;
- 2) $G_2 = A \rtimes B$, де A, B – елементарні абелеві p -групи, $A = \langle t \rangle \times \langle z \rangle \times \langle w \rangle$, $B = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$, $[u, t] = z \neq 1$, $[v, t] = w \neq 1$, $z, w \in Z(G_2)$;
- 3) $G_3 = \langle h \rangle \cdot P$, $P = \langle u, t \rangle$, $|h| = p^k$, $k > 1$, $|u| = |t| = p$, $h \in Z(G_3)$, $[u, t] = h^{\lambda \cdot p^{k-1}}$, $(\lambda, p) = 1$, $|P| = p^3$, $|G_3| = p^{k+2}$;
- 4) $G_4 = \langle h \rangle \times P$, $P = \langle u, t \rangle$, $[u, t] = z \in Z(G_4)$, $|u| = |t| = |z| = p$, $|h| = p^k$, $k > 1$.

Доведення. Нехай p -група $G = \langle a, b, c \rangle \in \tau^*$, де $p > 2$. За попереднім, група $G \in \{G_1, \dots, G_4\}$. Доведемо тепер обернене твердження.

Нехай група $G = G_1$. Очевидно, що $\exp G = p$ і комутант $G' = \langle c \rangle \leq Z(G)$. Розглянемо довільну підгрупу $H \leq G$ і припустимо $H \not\trianglelefteq G$. Покладемо $L = N_G(H)$. Оскільки $G' = \Phi(G)$, то H містить деякий твірний елемент h із G . Елементи $h, t, c \in L$, а тому підгрупа $M = \langle t, c, h \rangle \leq L$ і $|M| = p^3$. Оскільки $|G| = p^4$, то або $L = G$, або L – максимальна підгрупа в G . Якщо L – максимальна в G , то існує елемент $g \in G$ такий, що $G = L \rtimes \langle g \rangle$.

Нехай група $G = G_2$. Розглянемо підгрупу $R = \langle z, w \rangle \leq Z(G)$. Оскільки фактор-група G/R – абелева, то група $G \in \Delta_2$ і $p > 2$, а тому вона регулярна, звідси $\exp G = p$ і $\Phi(G) = G' = R = \langle z \rangle \times \langle w \rangle = Z(G)$. Дійсно, достатньо перевірити включення $Z(G) \leq R$. Нехай $g \in Z(G)$, тоді $g = u^\alpha \cdot v^\beta \cdot t^\gamma \cdot f$, де $f \in G'$. Звідси випливає, $h = u^\alpha \cdot v^\beta \cdot t^\gamma \in Z(G)$. Оскільки $1 = [h, u] = [t, u]^\gamma = z^{-\gamma}$, то $\gamma \vdots p$. Отже $u^\alpha \cdot v^\beta \in Z(G)$, а тому $1 = [u^\alpha \cdot v^\beta, t] = z^\alpha \cdot w^\beta$, звідси $\alpha \vdots p$ і $\beta \vdots p$. Одержали $Z(G) \leq \Phi(G) = G' = R$.

Розглянемо довільну підгрупу $H \leq G$ і її нормалізатор $L = N_G(H)$. Будемо вважати $L \neq G$ і позначимо $B = \langle u \rangle \times \langle v \rangle$. Припустимо підгрупа

$H \leq B \cdot Z(G) = D$. Оскільки D – абелева, то $D \leq L$, причому $|D| = p^4$. Звідси випливає, що L – максимальна в G підгрупа, а тому L має доповнення в G .

Нехай тепер $H \not\leq D$. Існує елемент $f \in H \setminus D$, а тому $f \notin \Phi(G)$. Підгрупа $S = \langle f \rangle \times Z(G) \leq L$ і $|S| = p^3$. Припустимо $L \cap B = \{1\}$, тоді $|L \wedge B| = p^5$, а тому $G = L \wedge B$.

Нехай тепер $L \cap B = L_1 \neq \{1\}$ і $|L_1| = p$. Існує підгрупа B_1 така, що $B = L_1 \times B_1$. Оскільки $L \cap B_1 = \{1\}$, $|L| = p^4$, то $G = L \wedge B_1$.

Припустимо тепер $B \leq L$. Маємо $S \cap B = \{1\}$. Дійсно, нехай елемент $1 \neq y \in S \cap B$, тоді $y = f^\lambda \cdot g$, де $g \in Z(G)$. Звідси $f^\lambda \in D$, а тому $\lambda \vdots p$, оскільки $f \notin D$, отже $y \in B \cap Z(G) = \{1\}$. Одержали суперечність, а тому $S \cap B = \{1\}$. У цьому випадку $G = L$, що за умовою неможливо.

Розглянемо тепер групу $G \cong G_3$. Якщо підгрупа $H \leq \langle h \rangle$, то $L = N_G(H) = G$ і все доведено. Припустимо $H \not\leq \langle h \rangle$. Оскільки $G/\langle h \rangle$ – абелева група, то $G \in \Delta_2$. Очевидно $\Phi(G) = \langle h^p \rangle$, а тому в H існує твірний елемент f групи G . Враховуючи, що $T = \langle h \rangle \cdot \langle f \rangle \leq L$, маємо $|L| = \frac{|h| \cdot |f|}{|\langle h \rangle \cap \langle f \rangle|} = \frac{p^k \cdot p^i}{p^j}$, де $j \leq i - 1$, а тому $|L| \geq p^{k+1}$. Оскільки за умовою $|G| = p^{k+2}$, то $L = G$ або L – максимальна в G . Нехай L – максимальна в G , тоді u або $t \notin L$. Якщо, наприклад, $u \notin L$, то $G = L \wedge \langle u \rangle$ і все встановлено.

Розглянемо групу $G \cong G_4$. У цьому випадку $\Phi(G) = \langle h^p \rangle \times \langle z \rangle \leq Z(G)$; а тому $G \in \Delta_2$. Розглянемо довільну підгрупу $H < G$ і нехай $H \not\leq Z(G)$. Отже в H існує нецентральний твірний елемент f групи G . Розглянемо підгрупу $T = \langle f \rangle \cdot Z(G)$. Оскільки $T \leq L = N_G(H) \neq G$; $Z(G) = \langle h \rangle \times Z(P) = \langle g \rangle \times \langle z \rangle$ і $|Z(G)| = p^{k+1}$, то маємо $|T| > p^{k+2}$. За умовою $|G| = p^{k+3}$, а тому підгрупа L – максимальна в G і елемент u або t не належить підгрупі L . Якщо $u \notin L$, то $G = L \wedge \langle u \rangle$. У випадку $u \in L$ і $t \notin L$ маємо $G = L \wedge \langle t \rangle$. Достатність встановлено. Теорему доведено.

Наслідок 1. Всяка 3-породжена p -група ($p > 2$) із класу τ^* має клас нільпотентності ≤ 2 .

На завершення наведемо приклад 3-породженої групи G , експоненти p , з нормальними нормалізаторами підгруп і у якій є нормалізатор, що не має доповнення в G .

Нехай $G = \langle u, t, f \rangle$, $|u| = |t| = |f| = p$, $p > 2$; $[u, t] = x$, $[u, f] = y$, $[t, f] = z$, $|x| = |y| = |z| = p$, $A = \langle x, y, z \rangle = \langle x \rangle \times \langle y \rangle \times \langle z \rangle \leq Z(G)$. Доведемо рівності $G' = A = \Phi(G) = Z(G)$. Фактор-група G/A – абелева, а тому $A = G'$. Нехай елемент $g \in Z(G)$, $g = d \cdot u^\alpha \cdot t^\gamma \cdot f^\delta$, де $d \in G'$. Маємо $1 = [g, f] = y^\alpha \cdot z^\gamma$, звідси $\alpha \vdots p$ і $\gamma \vdots p$; отже $g = d \cdot f^\delta$. Далі, $1 = [g, u] = z^{-\delta}$, а тому $\delta \vdots p$. Одержали $g = d \in G'$, тобто $G' = Z(G)$. Оскільки група $G \in \Delta_2$, то для довільних елементів $a, b \in G$ маємо $(a \cdot b)^p = a^p \cdot b^p \cdot [b, a]^{C_p^2}$. Враховуючи,

що $\exp G' = p$ і $p > 2$, маємо $(a \cdot b)^p = a^p \cdot b^p$. Звідси випливає, що $\exp G = p$.

Розглянемо нормалізатор $L = N_G(\langle f \rangle)$ і покажемо, що підгрупа L не має доповнення в групі G .

Оскільки $|G/\Phi(G)| = p^3$ і $|\Phi(G)| = p^3$, то $|G| = p^6$. Покажемо, що $|L| = p^4$. Маємо $G' \times \langle f \rangle \leq L$, а тому $|L| \geq p^4$. Оскільки комутатор $[f, u] = y^{-1} \notin \langle f \rangle$, то елемент $u \notin L$.

Нехай $|L| = p^5$, тоді $G = L \cdot \langle u \rangle$, звідси $t = h \cdot u^\alpha$, де $h \in L$. Далі маємо $z = [t, f] = [u, f]^\alpha = y^\alpha$, оскільки $N_G(\langle f \rangle) = C_G(\langle f \rangle)$ і $[h, f] = 1$, що суперечить умові $\langle y \rangle \cap \langle z \rangle = \{1\}$. Таким чином встановлено, що $|L| = p^4$ і, очевидно, $L = G' \times \langle f \rangle$.

Припустимо, що існує підгрупа H така, що $G = L \lambda H$. Тоді $|H| = p^2$ і за лемою 6 H – елементарна абелева підгрупа. Оскільки $G' = Z(G)$, то $G' = [L, H] = [\langle f \rangle, H]$. Покладемо $H = \langle a \rangle \times \langle b \rangle$, де $|a| = |b| = p$. Отже для довільного елемента $g \in G'$ маємо: $g = [f^\gamma, a^\alpha \cdot b^\beta] = [f, b]^{\gamma\beta} \cdot [f, a]^{\gamma\alpha}$, тобто комутант $G' = \langle [f, b], [f, a] \rangle$, звідси $|G'| \leq p^2$. Оскільки $|G'| = p^3$, то отримали суперечність. Таким чином група $G \notin \tau^*$.

Література

1. Hobby C. Finite groups with normal normalizers // Canad. J. Math. – 1968. – 20, №5. – P. 1256–1260.
2. Mahdavianary S.K. A special class of three-Engel groups // Arch. Math. – 1983. – 40, №3. – P. 193–199.
3. Mahdavianary S.K. A classification of 2-generator groups, $p \geq 3$ with many subgroups 2-subnormal // Arch. Math. – 1984. – 43, №2. – P. 97–107.
4. Mahdavi K. A classification of 2-generator 2-groups with many subgroups 2-subnormal // Commun. Algebra – 1987. – 15, №4. – P. 713–750.
5. Parmeggiani G. Of finite p -groups for ODD order with many subgroups 2-subnormal // Commun. Algebra – 1996. – 24, №8. – P. 2707–2719.
6. Ormerod E.A. Finite p -groups in which every cyclic subgroups is 2-subnormal // Glasg. Math. J. – 2002. – 44, №3. – P. 443–453.
7. Ormerod E.A., Parmeggiani G. Finite p -groups with normal normalisers // Bull. Aust. Math. Soc. – 2004. – 69, №1. – P. 141–150.
8. Buchthal D.S. Of factorized groups // Trans. Amer. Math. Soc. – 1973. – №183. – P.423–430.
9. Докторов И.П. О конечных группах с дополняемыми нормализаторами силовских подгрупп // Матем. заметки. – 1978. – 24, №2. – С.149–159.
10. Гормаш Т.Д. О нормальном строении конечных групп // Докл. АН БССР. – 1980. – 24, №11. – С.978–979.
11. Романовский А.В. Конечные группы с подгруппой Фробениуса // Матем. сб. – 1979. – 108, №4. – С.609–635.
12. Мельник Т.І. Примарні групи, у яких нормалізатори підгруп інваріантні і мають доповнення // Вісник КНУ. Серія: фіз.-матем. науки. – 2003. – № 4. – С. 39–54.

Надійшла до редакції 12.05.2005

УДК 519.9

Марина Ф. Семенюта*

Marina F. Semenyuta*

1-факторизації булевих кубів

Знайдена група автоморфізмів n -вимірного куба, його 1-факторизації з точністю до ізоморфізму при $n=5$. Встановлено, що квадратна 1-факторизація булевого куба єдина.

Ключові слова: n -вимірний куб, група автоморфізмів графу, факторизація, граф переплетень.

1-factorizations of the Boolean cube

The automorphism group of the n -dimensional Boolean cube and its 1-factorisations are found up to isomorphism, for $n=5$. We prove that the squared 1-factorisation of Q_n is unique.

Key Words: n -dimensional cube, automorphism group, factorization, graph of interlacing.

Розклади графів відносяться до класу задач про комбінаторні конфігурації, які з'явилися як допоміжні у дослідженнях Т. Кіркмана, Л. Камінгс, а в подальшому відокремилися у самостійний клас конфігурацій. У статті під графом розуміється скінчений неорієнтований звичайний граф без петель та кратних ребер. Викладено результати про знаходження групи автоморфізмів n -вимірного куба, про його квадратну 1-факторизацію та число 1-факторизацій Q_n з точністю до ізоморфізму при $n=5$, дано стислий огляд цих результатів.

1. Група автоморфізмів графу Q_n

В роботі [1] започатковано перелік неізоморфних 1-факторизацій графу Q_n , де Q_n – n -вимірний куб, його множину вершин будемо позначати $V(Q_n)$. Подібні дослідження проводили раніше для графу K_n Діксон і Сафорд [2] 1906 р., Гелінг [3, 4] 1973р., Петренюк Л. П., Петренюк А. Я. [5] 1980р., Дініц, Гарнік та МакКей [6] 1994 р.

Означення 1. n -вимірним (булевым) кубом називається граф у якого множина вершин – множина всіх n -компонентних бінарних векторів, і два вектори утворюють ребро тоді і тільки тоді, коли вони відрізняються тільки в одній компоненті.

Будемо позначати вершину графу Q_n цілим невід'ємним числом, двійковий запис якого зображує цю вершину. Для будь-яких суміжних вершин v_k, v_l графу Q_n виконується рівність $|v_k - v_l| = 2^m$, для деякого $m=0, 1, \dots, n-1$.

Означення 2. Підграф F графу G порядку n називають 1-фактором графу G , якщо F є регулярний граф степеня 1 і порядку n .

Означення 3. 1-факторизацією графу G називають множину Φ 1-факторів цього графа, якщо кожне ребро G належить тільки одному фактору з Φ .

В подальшому будемо розглядати задачу знаходження $\text{pnf}(Q_5)$, тобто числа 1-факторизацій графу Q_5 з точністю до ізоморфізму. Для цього знайдемо групу автоморфізмів $\text{Aut}(Q_5)$ графу Q_5 . Цю задачу розв'яжемо в загальному вигляді.

Розглянемо множину H , її елементами будуть підстановки, одержані під дією оператора S – інверсії бітів в двійковому запису номерів вершин Q_n . Можна інвертувати $0; 1; \dots; n-1$ біт, тому число таких інверсій 2^n . Під дією підстановок з H на Q_n , його зв'язність не порушується і виконується рівність $|v_k - v_l| = 2^m$, для довільних суміжних $v_k, v_l \in V(Q_n)$; $m=0, 1, \dots, n-1$, яка після інверсії, тобто під дією, наприклад, підстановки a , прийме вигляд: $|a(v_k) - a(v_l)| = 2^m$. Тому H є підмножиною групи автоморфізмів $\text{Aut}(Q_n)$ графу Q_n . Розглянемо підстановки $a_i \in H, a_j \in H$, тоді підстановка $a_i a_j$ також інверсія і належить до H , крім цього $a_i^{-1} = a_i \in H$. Отже H – підгрупа групи $\text{Aut}(Q_n)$ [7]. Твірними елементами цієї підгрупи є тотожна підстановка e та підстановки a_i – інверсія i -го біта, де $i=0, 1, \dots, n-1$. Ми довели теорему.

Теорема 1. Підстановки, одержані інверсією бітів в двійковому запису номерів вершин графу Q_n утворюють підгрупу H групи $\text{Aut}(Q_n)$, порядок H дорівнює 2^n .

Позначимо $T_{(i,j)}$ оператор, під дією якого на множину $V(Q_n)$ відбувається обмін місцями i -го та j -го бітів (транспозиція) в двійковому коді вершин Q_n . Довільна транспозиція $T_{(i,j)}$ або не впливає на номер вершини, якщо переставляються однакові двійкові цифри, або переставляє місцями пари вершин, які відрізняються цифрами, що стоять на i -му та j -му місцях в двійковому запису номерів.

Суміжність вершин при цьому не порушується та виконується співвідношення для відстані між суміжними вершинами:

$$\text{якщо } |v_k - v_l| = 2^m, \text{ то } |T_{(i,j)} v_k - T_{(i,j)} v_l| = \begin{cases} 2^m, & \text{при } m \neq i; m \neq j, \\ 2^i, & \text{при } m = i; m \neq j, \\ 2^j, & \text{при } m = j; m \neq i. \end{cases}$$

В результаті застосування всіх можливих суперпозицій $T_{(i,j)}$ на $V(Q_n)$ отримаємо підстановки $b_1, b_2, \dots, b_r$, які залишають

нерухомими дві вершини $\underbrace{0 \ 0 \ \dots \ 0}_n$ та $\underbrace{1 \ 1 \ \dots \ 1}_n$, і число вказаних підстановок дорівнює $r = n!$, причому $b_1 = e$ – тотожна підстановка.

Множина, яку позначимо B , утворених за допомогою транспозиції підстановок є підгрупою групи $Aut(Q_n)$. Підстановки $b_{n,j}$ – транспозиція 0-го та j -го бітів є твірними в B ($j=0, 1, \dots, n-1$), їх кількість дорівнює n .

Теорема 2. Підстановки, одержані транспозицією бітів в двійковому запису номерів вершин графу Q_n утворюють підгрупу B порядку $n!$ групи $Aut(Q_n)$.

Підстановки, одержані дією на $V(Q_n)$ операторів S і T , є твірними для групи автоморфізмів графу Q_n . Композиція підстановок, утворених різними операторами, є підстановка, її позначимо s_k , що не належить H і не належать B . Але s_k не порушує зв'язність Q_n і є автоморфізмом.

Розглянемо Hb – ліві суміжні класи групи $Aut(Q_n)$ по H . Всі вони різні [7].

Отже $Aut(Q_n) = H + Hb_2 + Hb_3 + \dots + Hb_{n-1}$.

Згідно з теоремою Лагранжа потужність множини $Aut(Q_n)$ дорівнює $2^n \cdot n!$. Довели наступну теорему.

Теорема 3. Порядок групи автоморфізмів графа Q_n дорівнює $2^n \cdot n!$.

За допомогою програми побудовано групу $Aut(Q_5)$, порядок якої дорівнює $2^5 \cdot 5! = 3840$.

2. Перелік 1-факторизацій графу Q_5

На даний час відомо $pnf(Q_2)=1$; $pnf(Q_3)=2$; $pnf(Q_4)=35$ [1]. Нами проведено конструктивний перелік з точністю до ізоморфізму 1-факторизацій графу Q_5 і знайдено $pnf(Q_5)$.

Означення 4. Дві 1-факторизації Φ_1 і Φ_2 називаються ізоморфними, якщо існує взаємно однозначна відповідність між множинами вершин відповідних 1-факторів даних факторизацій, яка здійснює ізоморфізм між цими факторами.

Ізоморфність факторизацій є відношенням еквівалентності. Кожна 1-факторизація представляє множину всіх факторизацій, що їй ізоморфні. Цю множину називають ізоморфним класом.

Перелічити 1-факторизації даної множини з точністю до ізоморфізму означає вказати кількість непорожніх ізоморфних класів у цій множині.

Провести конструктивний перелік, з точністю до ізоморфізму, даної множини факторизацій означає побудувати список факторизацій з цієї

множини, у якому присутній один і тільки один представник від кожного класу ізоморфізму.

Означення 5. Канонічною формою 1-факторизації Φ називають лексикографічно найменший з стандартних записів образів цієї факторизації Φ , одержаних в результаті дії на неї всіх підстановок з даної множини.

За допомогою комплексу програм, складених нами, одержано перелік з точністю до ізоморфізму 1-факторизацій графу Q_5 , які зображено у канонічній формі.

*Алгоритм переліку з точністю до ізоморфізму
1-факторизацій графу Q_n :*

Використавши шаблонне задання графу, будуємо 1-факторизацію графа Q_n , формуючи послідовно 1-фактори методом повного перебору, зафіксувавши перше ребро кожного фактора.

Діємо на 1-факторизацію підстановками з групи автоморфізмів графу Q_n , перевіряючи на ізоморфність цю факторизацію з вже побудованими факторизаціями. Якщо ізоморфна зустрічалася, то відкидаємо цю факторизацію. Якщо одержали не ізоморфну 1-факторизацію, то вона додається в список не ізоморфних 1-факторизацій.

Теорема 4. Існують, з точністю до ізоморфізму, точно 522 1-факторизації графу Q_5 , тобто $nrf(Q_5)=522$.

Попарне об'єднання 1-факторів F_i та F_j деякої 1-факторизації Φ називають *графом переплетень* цих факторів в Φ , яке позначимо Γ_{ij} . Для булевого куба Q_n граф Γ_{ij} представляє собою множину циклів. Якщо Γ_{ij} має r_α циклів довжини $2s_\alpha$, де $2 \leq s_1 < \dots < s_m = 2^{n-1}$ і $\sum_{\alpha=1}^m r_\alpha s_\alpha = 2^{n-1}$, то вектор $(s_1^{r_1}, s_2^{r_2}, \dots, s_m^{r_m})$ називають *типом переплетень* 1-факторів F_i та F_j .

Нехай $\mu = \mu(2^{n-1})$ кількість розбиттів числа 2^{n-1} на частини, кожна з яких не менше 2. Кожен тип переплетень є специфікацією якогось з цих розбиттів. Позначимо $T_1, T_2, \dots, T_\mu$ специфікації розбиттів, записані в лексикографічному порядку. Випишемо їх для графу Q_5 , користуючись комп'ютером, вважаючи символ s^r сумою з r чисел s . Відомо, що кількість всіх можливих розбиттів числа 16 дорівнює 231, а числа 15 – 176. Так як $16=15+1$ і частини розбиття більше за одиницю, то $\mu(2^4)=231-176=55$ [8]. Одержані дані подано в таблиці 1.

Таблиця 1.

№ i T_i	$\sum_{\alpha=1}^m r_\alpha s_\alpha = 16$	№ i T_i	$\sum_{\alpha=1}^m r_\alpha s_\alpha = 16$
1	2+2+2+2+2+2+2+2	28	2+4+4+6
2	2+2+2+2+2+2+4	29	2+4+5+5

3	2+2+2+2+2+3+3	30	2+4+10
4	2+2+2+2+2+6	31	2+5+9
5	2+2+2+2+3+5	32	2+6+8
6	2+2+2+2+4+4	33	2+7+7
7	2+2+2+2+8	34	2+14
8	2+2+2+3+3+4	35	3+3+3+3+4
9	2+2+2+3+7	36	3+3+3+7
10	2+2+2+4+6	37	3+3+4+6
11	2+2+2+5+5	38	3+3+5+5
12	2+2+2+10	39	3+3+10
13	2+2+3+3+3+3	40	3+4+4+5
14	2+2+3+3+6	41	3+4+9
15	2+2+3+4+5	42	3+5+8
16	2+2+3+9	43	3+6+7
17	2+2+4+4+4	44	3+13
18	2+2+4+8	45	4+4+4+4
19	2+2+5+7	46	4+4+8
20	2+2+6+6	47	4+5+7
21	2+2+12	48	4+6+6
22	2+3+3+3+5	49	4+12
23	2+3+3+4+4	50	5+5+6
24	2+3+3+8	51	5+11
25	2+3+4+7	52	6+10
26	2+3+5+6	53	7+9
27	2+3+11	54	8+8
		55	16

Вектор-індексом $\bar{l}(\Phi)$ 1-факторизації Φ називається вектор $(t_1, t_2, \dots, t_\mu)$, якщо в $\Phi \in l_h$ переплетень типу T_h ($h=1, 2, \dots, \mu$). Кожної факторизації відповідає Т-таблиця. Для довільної 1-факторизації Φ графу

$$Q_5 \text{ вона має вигляд: } T(\Phi) = \begin{vmatrix} t_1^{(1)} & t_2^{(1)} & \dots & \dots & t_{55}^{(1)} \\ t_1^{(2)} & t_2^{(2)} & \dots & \dots & t_{55}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ t_1^{(k)} & t_2^{(k)} & \dots & \dots & t_{55}^{(k)} \end{vmatrix} \begin{matrix} h_1 \\ h_2 \\ \dots \\ h_k \end{matrix}.$$

Це означає 1-фактор F_1 з іншими чотирма факторами має $t_1^{(1)}$ переплетень 1-го типу, $t_2^{(1)}$ переплетень 2-го типу, $\dots$, $t_{55}^{(1)}$ переплетень 55-го типу і т. д., h_k ($k=1, 2, 3, 4, 5$) – число переплетень в факторизації Φ з вектор-індексом $(t_1^{(k)}, t_2^{(k)}, \dots, t_{55}^{(k)})$.

Факторизація графу Q_n називається g -гомогенною, якщо Т-таблиця

складається з одного вектор-індексу $(t_1^{(1)} \ t_2^{(1)} \ \dots \ t_l^{(1)})$, $h_k=n$ і всі Γ_{ij} ізоморфні графові g . g -гомогенну факторизацію називають *квадратною*, якщо всі зв'язні компоненти графу g є цикли довжини 4. Відомо, що Q_n допускає квадратну 1-факторизацію при кожному n . При $n=2; 3; 4$ квадратна факторизація єдина [1]. Нами доведено таку теорему:

Теорема 5. Квадратна 1-факторизація графа Q_n єдина з точністю до ізоморфізму для кожного n .

Доведення.

Розглянемо квадратну 1-факторизацію Φ , яка існує для довільного булевого куба. Кожен 1-фактор такої факторизації має однакову різницю між вершинами, з'єднаними ребром. Його можна подати в таблиці (таблиця 2), записавши в першому рядку можливі відстані між вершинами, що належать одному ребру, в першому стовпці – фактори, що входять до Φ , всі інші елементи це кількість ребер з вказаною різницею для даного 1-фактора. Відповідний тип переплетень для Φ , як і для будь-якої іншої квадратної факторизації, має вид: $T_1 = \underbrace{2 + 2 + 2 + \dots + 2}_{n-1}$, а графі переплетень Γ_{ij} складаються з 2^{n-2} компонент, кожна з яких цикл довжини чотири C_4 , наприклад, Γ_{12} зображено на рис 1.

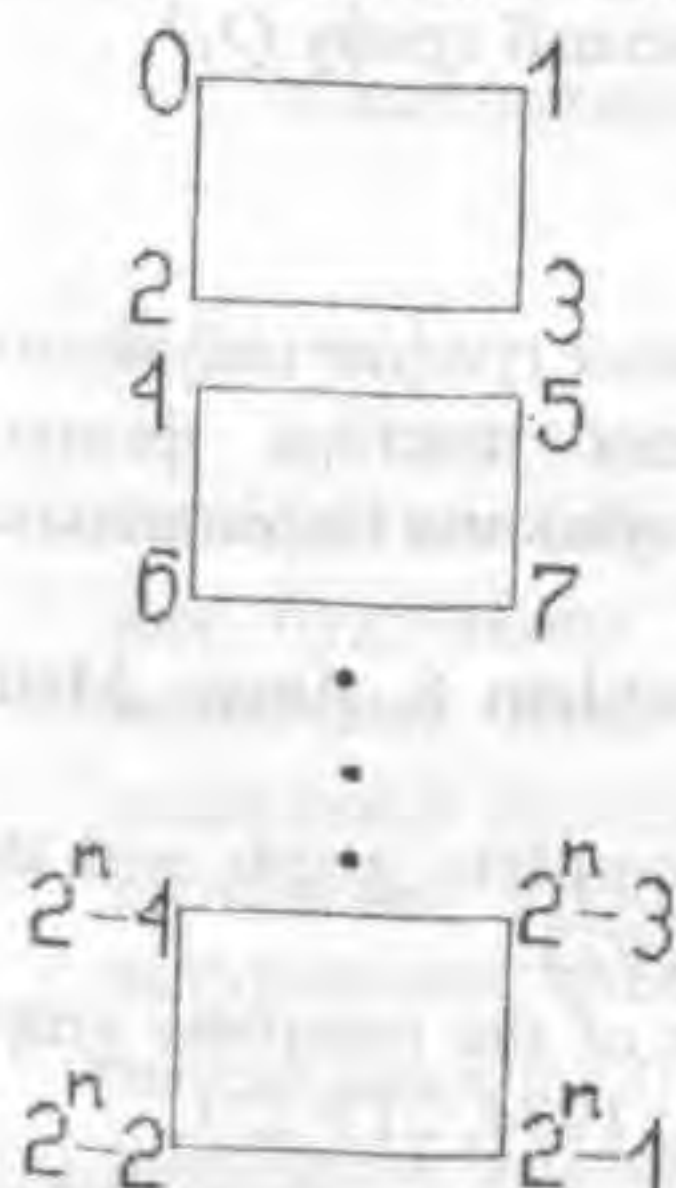


Рис 1

Таблиця 2.

	2^0	2^1	2^2	...	2^{n-1}
F_1	2^{n-1}	0	0	0	0
F_2	0	2^{n-1}	0	0	0
F_3	0	0	2^{n-1}	0	0
...	...	...	...	...	...
F_n	0	0	0	0	2^{n-1}

Нехай Φ' інша квадратна 1-факторизація не ізоморфна Φ і в неї існують 1-фактори, що містять ребра з різною різницею інцидентних ним вершин. Нехай, для зручності в F'_1 знаходиться ребро (v_i, v_j) , таке що $|v_i - v_j| = 2^m$, тоді знайдеться фактор, позначимо його F'_2 , для якого $|v_i - v_r| = 2^{m_1}$ та $|v_j - v_s| = 2^{m_2}$, де $m_1 \neq m_2$. Отже

в графі переплетень Γ'_{12} вершинам v_i та v_j , ребра (v_i, v_j) , інцидентні ребра різної довжини (v_i, v_r) та (v_j, v_s) , тому в Γ'_{12} є цикл довжини більшої ніж чотири. Прийшли до протиріччя з припущенням, квадратна 1-факторизація графа Q_n єдина з точністю до ізоморфізму для кожного n . Теорему доведено.

Наприклад, для Q_4 у випадку обміну чотирьох ребер різниці 2^1 і 2^2 між факторами F_2 і F_3 таблиці Φ і Φ' будуть мати вигляд:

	2^0	2^1	2^2	2^3
F_1	8	0	0	0
F_2	0	8	0	0
F_3	0	0	8	0
F_4	0	0	0	8

	2^0	2^1	2^2	2^3
F_1	8	0	0	0
F_2	0	4	4	0
F_3	0	4	4	0
F_4	0	0	0	8

В графі переплетень $\Gamma'_{24}=F_2 \cup F_4$ є цикли довжини 8.

Наслідок. Група автоморфізмів квадратної 1-факторизації графу Q_n співпадає з групою автоморфізмів цього графу.

Доведення.

Під дією підстановок підгрупи H , з теореми 1, на квадратну 1-факторизацію Φ кожен фактор переходить в себе. Під дією підстановок підгрупи B , з теореми 2 фактори Φ переходять в себе або один в інший. Згідно з теоремою 3 група автоморфізмів Φ співпадає з групою автоморфізмів Q_n , причому $|\text{Aut}(\Phi)| = |\text{Aut}(Q_n)| = 2^n \cdot n!$.

Якщо Т-таблиці факторизацій Φ_1 і Φ_2 різні, то Φ_1 і Φ_2 неізоморфні. При однакових таблицях питання про ізоморфність залишається відкритим. Ставляться питання:

- 1) Побудувати Т-таблиці для кожної 1-факторизації графу Q_5 з метою дослідження розрізняючої спроможності цього інваріанту.
- 2) Чи існують, крім квадратної, g -гомогенні 1-факторизації графу Q_5 ?
- 3) Узагальнити результати на випадок графу Q_n .

Література

1. Петренюк А. Я. Екстремальні розклади повних графів: існування, перелік. Дисертація на здобуття вченого степеня доктора фізико-математичних наук. Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова Національної академії наук України. Київ-2002 р., 163-167 (266 с.)
2. Dickson L. E., Safford F. N. Solution to problem 8. Amer. Math. Monthly, 1906, 13, 150-151.
3. Gelling E. N., On 1-factorizations of the complete graph and the relationship to round robin schedules, Univ. of Victoria, 1973.
4. Gelling E. N., Odeh R. E. On 1-factorizations of the complete graph and the relationship to round robin schedules, Util. Math., 1974, 213-221.
5. Петренюк Л. П., Петренюк А. Я., О перечислении совершенных 1-факторизаций полных графов, Кибернетика (Київ), 1980, 1, 6-8.
6. Dinitz J. H., Garnick D. K., McKay B. D., There are 516 915 620 nonisomorphic perfect one-factorizations of K_{12} . Journal of Combinatorial Designs, 1994, 2, 273-285.
7. М. Холл, Теория групп, Издательство иностранной литературы, Москва, 1962 г..
8. М. Холл, Комбинаторика, Издательство «Мир», Москва, 1970 г..

Надійшла до редакції 23.11.2005

УДК 519.9

Ганна О. Стронська*

Напівгрупа стискуючих перетворень булеану скінченної множини. Серія: фізико-математичні науки.

В роботі вивчається будова напівгрупи стискуючих перетворень впорядкованої за включенням множини всіх підмножин множини перших n натуральних чисел. Описано структуру максимальних нільпотентних піднапівгруп, наведено необхідні умови ізоморфності двох максимальних нільпотентних піднапівгруп.

Ключові слова: Напівгрупа, стискуюче перетворення, нільпотентна піднапівгрупа, булеан.

Ganna O. Stronska*

The semigroup of the order-decreasing transformations of the set of all the subsets of a finite set. Series: Physics & Mathematics

This paper deals with the structure of the semigroup of the order-decreasing transformations of ordered by inclusion set of all the subsets of the set of first n natural numbers. The structure of maximal nilpotent subsemigroups is described; besides, there are necessary requirements for two maximal nilpotent subsemigroups to be isomorphic.

Key Words: Semigroup, order-decreasing transformation, nilpotent subsemigroup, the set of all the subsets.

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

1. Вступ.

Перетворення α частково впорядкованої множини Ω називається стискуючим (або перетворенням з пониженням порядку), якщо $\alpha(x) \leq x$ для будь-якого x із Ω . Множину всіх стискуючих перетворень Ω позначимо через $D(\Omega)$. Легко бачити, що $D(\Omega)$ є напівгрупою відносно композиції перетворень. Вперше такі напівгрупи з'явилися у [1] у зв'язку з питаннями формальних мов. Випадок, коли Ω є множиною перших n натуральних чисел $\{1, \dots, n\}$ із звичайним відношенням лінійного порядку, розглядався у [2] та [3] Хав'є та Хіггінсом відповідно. Учень Хав'є Умар присвятив вивченню різноманітних властивостей $D(\{1, \dots, n\})$ цілий ряд робіт, розглядаючи, зокрема, ідеали, рісівські конгруенції та відношення Гріна на цій напівгрупі (див., наприклад, [4, 5]). Більш загальна напівгрупа стискуючих перетворень довільного скінченного графа розглянута у [6] Верницьким.

Якщо частково впорядкована множина Ω містить найменший елемент, то напівгрупа $D(\Omega)$ має природний нуль 0 – відображення, яке всі елементи Ω переводить у цей елемент. Тому можна розглядати нільпотентні піднапівгрупи $D(\Omega)$. Зокрема, дослідженню нільпотентних піднапівгруп напівгруп стискуючих перетворень множини $\{1, \dots, n\}$,

кореневого дерева та променя присвячені роботи [7], [8], [9]. Поруч із лінійно-впорядкованими множинами в багатьох розділах математики часто зустрічається множина $B(M)$ всіх підмножин даної множини M , природно впорядкована за включенням. Дана робота присвячена вивченню структури піднапівгруп, максимальних серед усіх нільпотентних піднапівгруп напівгрупи $D(B(\{1, \dots, n\}))$ (коротко $D(\mathbf{B}_n)$) фіксованого ступеня k . При цьому використовується метод, який вперше з'явився в [10] і описаний в [11].

2. Означення і початкові твердження.

Напівгрупа S з нулем 0 називається нільпотентною, якщо для деякого натурального l виконується рівність $S^l = 0$, при цьому мінімальне таке число l називається ступенем нільпотентності напівгрупи S .

Елемент a напівгрупи з нулем S називається ніль-елементом, якщо для деякого натурального m виконується рівність $a^m = 0$. Зрозуміло, що нільпотентна напівгрупа складається з ніль-елементів, але ніль-елементи не завжди утворюють нільпотентну напівгрупу.

Булеан множини $\{1, \dots, n\}$ будемо позначати скорочено як $\mathbf{B}_n$.

Для довільного елемента s із $D(\mathbf{B}_n)$ позначимо $\text{dom } s = \{M \in \mathbf{B}_n \mid s(M) \neq \emptyset\}$, $\text{ran } s = s(\mathbf{B}_n) \setminus \{\emptyset\}$. Число $|\text{ran } s|$ будемо називати рангом елемента s і позначати як $\text{rank } s$.

Твердження. Порядок напівгрупи $D(\mathbf{B}_n)$ дорівнює $(2^n)^{2^n}$.

Природним нулем 0 напівгрупи $D(\mathbf{B}_n)$ є перетворення, яке всі елементи $\mathbf{B}_n$ переводить у порожню множину $\emptyset$.

Позначимо через $\text{Nil}(\mathbf{B}_n, k)$ множину піднапівгруп із $D(\mathbf{B}_n)$, що є максимальними серед усіх нільпотентних піднапівгруп ступеня нільпотентності k напівгрупи $D(\mathbf{B}_n)$.

Зауважимо, що елемент α із $D(\mathbf{B}_n)$ є ніль-елементом тоді і тільки тоді, коли множина нерухомих точок відображення α містить лише один елемент із $\mathbf{B}_n$, а саме $\emptyset$, до того ж ступінь нільпотентності елемента α не більший за n . Звідси легко випливає

Твердження 1. Всі ніль-елементи $D(\mathbf{B}_n)$ утворюють піднапівгрупу. Зокрема, в $D(\mathbf{B}_n)$ існує єдина максимальна нільпотентна піднапівгрупа і її

порядок дорівнює $\prod_{i=1}^n (2^i - 1)^{\binom{n}{i}}$, а ступінь нільпотентності – n .

Введемо на множині елементів $D(\mathbf{B}_n)$ відношення еквівалентності $\sim^*$ наступним чином:

$$(\phi \sim^* \psi) \Leftrightarrow (\forall s \in T : \phi s = \psi s, s \phi = s \psi).$$

Зауваження 2. $\sim^*$ є конгруенцією на $D(\mathbf{B}_n)$.

Нехай T – напівгрупа із $\text{Nil}(\mathbf{B}_n, k)$, $\alpha \in T$. Позначимо

$dom^*_T \alpha = \bigcap_{\beta \in T, \alpha \sim^* \beta} dom \beta$; $ran^*_T \alpha = \bigcap_{\beta \in T, \alpha \sim^* \beta} ran \beta$. Надалі, коли буде зрозуміло про яку напівгрупу $T \in Nil(D(\mathbf{B}_n), k)$ іде мова, будемо писати $dom^* \alpha$ і $ran^* \alpha$ замість $dom^*_T \alpha$ і $ran^*_T \alpha$.

3. Структура максимальних нільпотентних піднапівгруп.

Зафіксуємо деяке натуральне k менше або рівне n і розглянемо множину $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ впорядкованих (із заданим порядком блоків) розбиттів множини $\mathbf{B}_n \setminus \{\emptyset\}$ на k непорожніх блоків $Q_1, \dots, Q_k$, що задовольняють наступні умови:

$$\forall i, 1 \leq i < k, \forall A \in Q_i \exists B \in Q_{i+1} : B \subset A \quad (1)$$

$$\forall i, 1 < i \leq k, \forall A \in Q_i :$$

$$(\exists B \in Q_i, B \subset A) \Rightarrow (\exists B_1 \in Q_1, \dots, B_{i-1} \in Q_{i-1}, B_1 \supset \dots \supset B_{i-1} \supset A)$$

(2)

Для деякого розбиття λ із $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ з блоками $Q_1, \dots, Q_k$ розглянемо $T_\lambda = \{\alpha : \mathbf{B}_n \rightarrow \mathbf{B}_n \mid \forall m \leq k, \forall A \in Q_m : (\varphi(A) \in (Q_{m+1} \cup \dots \cup Q_k \cup \{\emptyset\})) \wedge \varphi(A) \subset A\}$. Легко перевірити, що T_λ є піднапівгрупою $D(\mathbf{B}_n)$.

Лема 3. $T_\lambda \in Nil(\mathbf{B}_n, k)$.

Нехай T – напівгрупа із $Nil(\mathbf{B}_n, k)$. Визначимо частковий порядок $<^T$ на $\mathbf{B}_n$ наступним чином:

$$A <^T B \Leftrightarrow \exists \varphi \in T \quad \varphi(B) = A.$$

Оскільки T є піднапівгрупою D_T , то з $A <^T B$ випливає $A < B$.

Далі розглядаємо ряд множин

$$P_1 = \{A \in \mathbf{B}_n \mid \forall B \in \mathbf{B}_n, (A <^T B) \Rightarrow (B = \emptyset)\};$$

$$P_2 = \{A \in \mathbf{B}_n \mid \forall B \in \mathbf{B}_n, (A <^T B) \Rightarrow (B \in P_1)\};$$

$$P_3 = \{A \in \mathbf{B}_n \mid \forall B \in \mathbf{B}_n, (A <^T B) \Rightarrow (B \in P_1) \vee (B \in P_2)\};$$

...

$$P_p = \{A \in \mathbf{B}_n \mid \forall B \in \mathbf{B}_n, (A <^T B) \Rightarrow (B \in P_1) \vee (B \in P_2) \vee \dots \vee (B \in P_{p-1})\};$$

...

Нехай $p_{\max}$ – найбільший з індексів p , для яких P_p непорожня. З того, що напівгрупа T має ступінь нільпотентності k ми одержуємо рівність $p_{\max} = k$. Легко бачити, що $P_1 \cup \dots \cup P_k = \mathbf{B}_n \setminus \emptyset$ і для будь-яких менших за k індексів i, j виконується $P_i \cap P_j = \emptyset$. Визначимо розбиття λ_T множини $\mathbf{B}_n$ як сукупність блоків $Q_1, \dots, Q_k$, де $Q_i = P_{k-i+1} \quad \forall i, 1 \leq i \leq k$.

Лема 4. Для будь-якої напівгрупи $T \in Nil(\mathbf{B}_n, k)$ розбиття λ_T належить до $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$.

Теорема 5. Відображення φ та ψ , визначені наступним чином:

$\varphi : \Lambda(\mathbf{B}_n, k) \rightarrow Nil(\mathbf{B}_n, k), \forall \lambda \in \Lambda(\mathbf{B}_n, k) \varphi(\lambda) = T_\lambda$ та

$\psi : Nil(\mathbf{B}_n, k) \rightarrow \Lambda(\mathbf{B}_n, k), \forall T \in Nil(\mathbf{B}_n, k) \psi(T) = \lambda_T$

є взаємно-оберненими і визначають взаємно-однозначну відповідність між множинами $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ та $Nil(\mathbf{B}_n, k)$.

4. Необхідні умови ізоморфізму.

Для доведення основного результату розділу – теореми 25 нам потрібні будуть наступні леми:

Лема 6. Нехай λ – розбиття із $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ із блоками $Q_1, Q_2, \dots, Q_k$. Тоді множина $\{N\}$, де $N = \{1, \dots, n\}$, належить до Q_1 .

Лема 7. Нехай λ – розбиття із $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ із блоками $Q_1, Q_2, \dots, Q_k$. Тоді

$$\forall i \in \{2, k\}, \forall A \in Q_i \exists B \in Q_{i-1} : A \subset B \quad (3)$$

Наслідок 8. Розбиття $\lambda = Q_1 \cup Q_2 \cup Q_3$ множини $\mathbf{B}_n \setminus \emptyset$ належить до $\Lambda(\mathbf{B}_n, 3)$ тоді і тільки тоді, коли воно задовольняє умови (1) і (3).

Наслідок 9. Нехай λ – розбиття із $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$ із блоками $Q_1, Q_2, \dots, Q_k$. Тоді для будь-яких $p, l \in N$ існує така множина A із Q_{k-1} , що $\{p, l\} \subset A$.

Лема 10. Нехай $\lambda \in \Lambda(\mathbf{B}_n, k), \lambda = Q_1 \cup \dots \cup Q_k, A \in Q_i, i > 1$ і не існує такого ланцюга множин $B_1 \in Q_1, \dots, B_{i-1} \in Q_{i-1}$, що $B_1 \supset \dots \supset B_{i-1} \supset A$. Тоді

$$(B \in \mathbf{B}_n, B \supset A) \Rightarrow (B \in Q_1 \cup \dots \cup Q_{i-1}).$$

Нехай $T \in Nil(D(\mathbf{B}_n), k)$ із відповідним розбиттям $\lambda \in \Lambda(\mathbf{B}_n, k), \lambda = Q_1 \cup \dots \cup Q_k$.

Зауваження 11. Нехай ϕ, ψ належать T . Тоді $(\phi \sim^* \psi)$ тоді і тільки тоді, коли

$$\forall M \in \mathbf{B}_n \setminus Q_1 (\phi(M) = \psi(M));$$

$$\forall M \in \mathbf{B}_n, \phi(M) \in \bigcup_{i=1}^{k-1} Q_i (\phi(M) = \psi(M)).$$

Зауваження 12. Нехай ϕ належить T . Тоді

$$dom^* \phi = dom \phi \setminus \{A \in Q_1 : \phi(A) \in Q_k\}; \quad ran^* \phi = ran \phi \setminus \{A \in Q_k : \phi^{-1}(A) \in Q_1\}$$

Лема 13. Нехай ϕ_1, ϕ_2 із T . Маємо:

$$ran \phi_1 \cap (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1}) \subset ran \phi_2 \cap (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1}) \text{ тоді і тільки тоді, коли } \{s \in T : \phi_1 s \neq 0\} \subset \{s \in T : \phi_2 s \neq 0\}.$$

Наслідок 14. Нехай ϕ із $T, ran^* \phi \subset (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1})$. Тоді

$$|ran^* \phi| = 1 \Leftrightarrow (\forall \psi \in T : \{s \in T : \psi s \neq 0\} \subset \{s \in T : \phi s \neq 0\}).$$

Зауваження 15. Для елемента ϕ із T такого, що $|ran^* \phi \cap (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1})| = 1$ та $i, 1 < i < k$, умова $(\exists A \in Q_i : A \in ran \phi)$ виконується тоді і тільки тоді, коли існують такі $s_1, s_2, \dots, s_{k-i} \in T$, що $s_1 \cdot s_2 \cdot \dots \cdot s_{k-i} \neq 0$, але для будь-яких $\psi_1, \dots, \psi_{k-i+1}$ із T добуток $\phi \cdot \psi_1 \cdot \dots \cdot \psi_{k-i+1}$ дорівнює нулю.

Зауваження 16. Для елемента ϕ із T та i , $1 < i < k$, умова $(\exists A \in Q_i : A \in \text{ran}^* \phi)$ виконується тоді і тільки тоді, коли існують такі $s_1, s_2, \dots, s_{k-i} \in T$, що $s_1 \cdot s_2 \cdots s_{k-i} \neq 0$, але для будь-яких $\psi_1, \dots, \psi_{k-i+1}$ із T добуток $\phi \cdot \psi_1 \cdots \psi_{k-i+1}$ дорівнює нулю.

Лема 17. Нехай $Y = \{\psi \in T : |\text{ran}^* \psi| = 1, \text{ran}^* \psi \in Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1}\}$.

Тоді для $\phi \in Y$ рівність $\text{dom}^* \phi = N$ виконується тоді і тільки тоді, коли $\forall \xi \in Y, \exists \sigma, \psi \in Y, \exists \phi_1, \psi_1 \in T : \text{ran}^* \xi = \text{ran}^* \psi, \phi \phi_1 = \sigma \phi_1, \psi \psi_1 = \sigma \psi_1$.

Наслідок 18. $|Q_2| + |Q_3| + \dots + |Q_{k-1}| = |\{\text{ran}^* \phi : \phi \in Y, \text{dom}^* \phi = N\}|$.

Зауваження 19. $|Q_i| = |\{\text{ran}^* \phi : \phi \in T, \text{dom}^* \phi = N, \text{ran}^* \phi \in Q_i\}|$.

Зауваження 20. Нехай ϕ із T . Маємо, що $|\text{dom}^* \phi \cap (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1})| = 1$ тоді і тільки тоді, коли для всіх ψ_1 та ψ_2 із Y таких, що $\text{dom}^* \psi_1 = \text{dom}^* \psi_2 = N$ з того, що $\psi_1 \phi \neq 0$ і $\psi_2 \phi \neq 0$ випливає, що $\text{ran}^* \psi_1 = \text{ran}^* \psi_2$.

Зауваження 21. Нехай ϕ із T і $|\text{dom}^* \phi \cap (Q_2 \cup \dots \cup Q_{k-1})| = 1$. Тоді $\text{dom}^* \phi \cap Q_i \neq \emptyset$ тоді і тільки тоді, коли для відображення ψ такого, що $\text{dom}^* \psi = N$ і $\psi(N) = \text{dom}^* \phi$, у T існують $\phi_1, \dots, \phi_{k-i}$ такі, що $\psi \cdot \phi_1 \cdot \phi_2 \cdots \phi_{k-i} \neq 0$, але для будь-яких $\psi_1, \dots, \psi_{k-i+1}$ добуток $\psi \cdot \psi_1 \cdot \psi_2 \cdots \psi_{k-i+1}$ дорівнює нулю.

Зауваження 22. Нехай ϕ, ψ із T , $|\text{dom}^* \phi| = 1, \text{dom}^* \phi \in Q_{k-1}$. Зрозуміло, що $\text{ran}^* \phi \in Q_k, \text{ran}^* \psi \in Q_k$. Тоді $\text{ran}^* \phi = \text{ran}^* \psi$ тоді і тільки тоді, коли існують ϕ_N, ψ_N такі, що $\text{dom}^* \psi = \text{dom}^* \phi$ і $\phi_N \phi = \psi_N \psi \neq 0$.

Зауваження 23. $|Q_k| = |\{\text{ran}^* \phi : \phi \in T, |\text{dom}^* \phi| = 1, \text{dom}^* \phi \in Q_{k-1}\}|$.

Лема 24. Число $|Q_i|$ визначається із таблиці множення напівгрупи T .

Зауваження 25. Число n визначається із таблиці множення напівгрупи T .

Теорема 26. Нехай T_1, T_2 – напівгрупи із $\text{Nil}(\mathbf{B}_n, k)$, $\lambda_1 = Q_1^1 \cup \dots \cup Q_k^1$ і $\lambda_2 = Q_1^2 \cup \dots \cup Q_k^2$ – відповідні їм розбиття із $\Lambda(\mathbf{B}_n, k)$. Тоді якщо T_1 і T_2 є ізоморфними, то для будь-яких i , $1 \leq i \leq k$ виконується рівність $|Q_i^1| = |Q_i^2|$.

Твердження 27. Нехай T_1, T_2 – напівгрупи із $\text{Nil}(\mathbf{B}_n, k)$ та $\text{Nil}(\mathbf{B}_m, k)$ відповідно, причому $n \neq m$. Тоді T_1 і T_2 – неізоморфні.

Література

1. J.E. Pin. Varieties of formal languages. // North Oxford Academic Publishers Ltd, 1986.

2. J. M. Howie. Combinatorial and probabilistic results in transformation semigroups. // Words, languages and combinatorics II. Proceedings of the 2nd international conference. Singapore: World Scientific, 1994, 200-206.
3. P. Higgins. Combinatorial results for semigroups of order-preserving mappings. // Math. Proc. Camb. Phil. Soc, 1993, p.113.
4. A. Umar. On the ranks of certain finite semigroups of order-decreasing transformations. // Portugaliae Mathematica, 1996, vol. 53, Fasc.1, 23-34.
5. A. Umar. On the semigroups of order-decreasing finite full transformations. // Proceeding of the Royal Society of Edinburgh, 1992, vol. 120A, p. 129-142.
6. A. Vernitskii. Semigroups of order-decreasing graph endomorphism. // Semigroup Forum, 1999, vol. 58, 222-240.
7. A. Stronska. Nilpotent subsemigroups of the semigroup of order-decreasing transformations. // Математичні Студії, 2004, Vol. 22, No. 2, p. 184 - 197.
8. Anna Stronska. Nilpotent subsemigroups of a semigroup of order-decreasing transformations of a rooted tree. // Algebra and Discrete Mathematics (to appear).
9. A. Stronska. On the automorphisms for the nilpotent subsemigroups of the order order-decreasing transformations semigroup. // Вопросы алгебры. (to appear).
10. О. Г. Ганюшкін, Т. В. Кормишева. Ізольовані і нільпотентні піднапівгрупи інверсно-симетричної напівгрупи. // Доповіді АН України, 1993, 9, ст. 5-9.
11. O.G. Ganyushkin, V. S. Mazorchuk. On the structure of IO_n . // Semigroup Forum, vol.66(2003), p. 455-483.

Надійшла до редакції 03.12.2005

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

$$\rho(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + a \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(R(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(Q \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \right) = f(x, t) \quad (1)$$

де $\rho(x)$ [кг/м] – густина м'якої зв'язки;

$E(x)$ [Н/м²] – модуль пружності зв'язки;

$R(x)$ [Н] – момент інерції зв'язки;

Q [Н] – момент інерції зв'язки зв'язки;

$f(x, t)$ [Н/м] – зовнішня сила, що діє на зв'язку.

УДК 621.396.67

Олег О. Горошко, Дмитро В.
Кір'янов

Oleg O. Gorochko, Dmitro V.
Kiryanov

Стійкість та коливання антенної
щогли під дією вітрових
навантажень

Firmness and oscillation of
aerial mast under action of the
winds loadings

В статті розглянуто опис впливу вітрових
навантажень на стійкість та коливання
антенної щогли.

In the article description of influencing
of the winds loadings is considered on
firmness and oscillation of aerial mast.

Ключові слова: антенна щогла,
коливання, стійкість.

Key Words: aerial mast, oscillation,
firmness.

1. Вступ. Металеві щогли є складовою частиною вітрових електростанцій, опор ліній електропередач та антенних конструкцій засобів радіозв'язку. В багатьох випадках аеропружні коливання впливають на довговічність конструкції щогли та на надійність її функціонування [1].

В даній роботі формулюється та досліджується задача про динаміку та стійкість щогли в атмосферних потоках.

2. Побудова рівнянь динаміки. Розглядається трубчаста ступінчаста телескопічна антенна щогла, розчалена чотирма сталевими тросами (рис.1) в двох взаємно перпендикулярних площинах. На рис.1 зображена схема деформацій розчаленої антенної щогли в одній з вертикальних площин.

Для запису рівнянь коливань щогли в площині Ox введемо Лагранжеву систему координату Ox з пружною лінією щогли. Поперечні прогини щогли позначимо функцією $u(x, t)$. Поздовжні коливання щогли не розглядаються як малі в порівнянні з поперечними прогинами. В прийнятих позначеннях рівняння коливань щогли в відповідності з позначеннями, прийнятими в будівельній механіці мають таку форму:

$$p(x) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \alpha \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(P(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(EI \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \right) = f(x, t) . \quad (1)$$

де $p(x)$ [кг/м] – погонна маса щогли;

$EI(x)$ [Нм²] – згинна жорсткість щогли;

$P(x)$ [Н] – поздовжня стискаюча сила;

$f(x, t)$ [Н/м] – поперечне розподілене навантаження;

α [кг/м·сек] – узагальнений коефіцієнт енергії, виражений еквівалентом зовнішнього впливу.

Розподілена вага $p(x)$ та жорсткість $EI(x)$ для щогли ступінчастої конструкції в межах кожної ділянки є сталими величинами, що полегшує подальші дослідження.

Розподілене поперечне навантаження, обумовлене дією вітру та пружними реакціями тросів представимо так:

$$f(x, t) = f_0(x, t) - (T_1 + T_2)\delta(x - l) + Q(t)\delta(x - l_0). \quad (2)$$

Граничні умови для поперечних переміщень кінця щогли такі:

$$u(0, t) = 0, \quad \frac{\partial u(0, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial^2 u(l, t)}{\partial x^2} = 0, \quad \frac{\partial^3 u(l, t)}{\partial x^3} = 0. \quad (3)$$

Тут l – Лагранжева координата верхнього кінця щогли, l_0 – Лагранжева координата зосередженого вітрового навантаження на антенний пристрій.

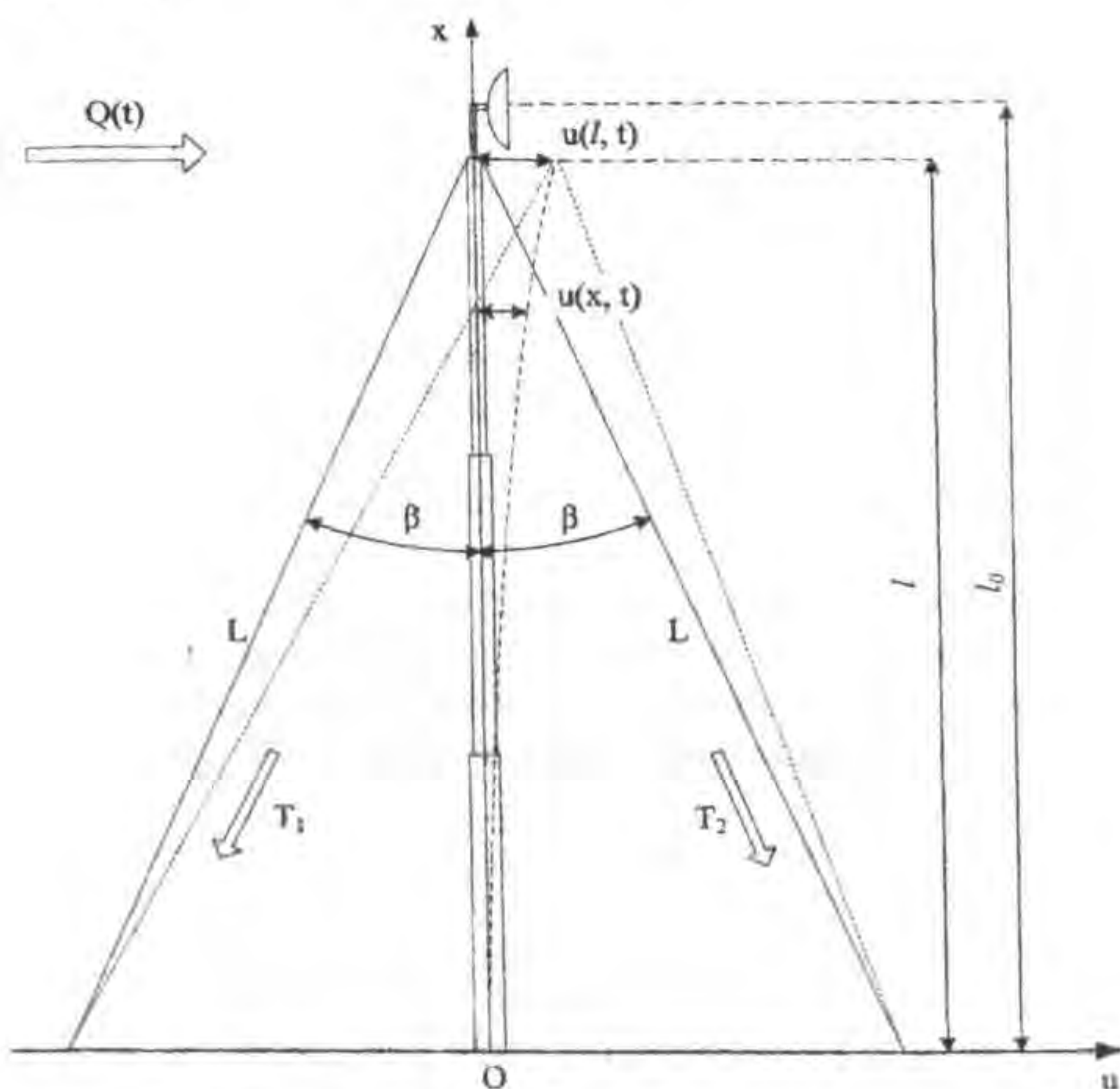


Рис.1. Схема деформації розчаленої щогли.

3. Дослідження коливань щогли. Розв'язок рівняння (1) будемо знаходити методом Гальоркіна [2] в такій формі:

$$u(x, t) = X(x)\theta(t), \quad (4)$$

де $X(x)$ – координатна функція, яка задовольняє граничним умовам (3); $\theta(t)$ – узагальнена координата. Представимо функцію $X(x)$ поліномом:

$$X(x) = x^2 - \frac{2x^3}{3l} + \frac{x^4}{6l^2}, \quad (5)$$

який задовольняє граничним умовам (3) і близький до першої форми вільних коливань.

Підставляючи вираз (4) в рівняння (1) побудуємо функціонал:

$$\int_0^l [p(x)X(x)\theta' + \alpha\theta'X(x) + EIX''''(x)\theta(t) + (P(x)X'(x))'\theta(t) - f(x,t)]X(x)dx = 0. \quad (6)$$

Обчислюючи значення інтегралів в (6):

$$a = \int_0^l X^2(x)p(x)dx, \quad c_1 = \int_0^l EIX''''(x)X(x)dx,$$

$$c_2 = \int_0^l (P(x)X'(x))'X(x)dx,$$

$$q(t) = \int_0^l f(x,t)X(x)dx, \quad b = \int_0^l \alpha(x)X^2(x)dx.$$

побудуємо диференціальне рівняння поперечних коливань щогли:

$$a\theta''(t) + b\theta'(t) + (c_1 + c_2)\theta(t) = q(t). \quad (7)$$

4. Дослідження коливань та стійкості антенної щогли.

Розглянемо спрощений випадок однорідної щогли $p(x) = p_0 = \text{const}$, $EI = \text{const}$. Конкретизуємо вирази пружної реакції на щоглу деформованих вантових тросів. Початковий натяг тросу T_0 визначається формулою:

$$T_0 = EF \frac{\Delta L}{L}.$$

Тут EF та L поздовжня жорсткість та довжина троса, ΔL – початкова деформація. При переміщенні кінця щогли на величину $u(l, t)$ виникають додаткові натяги тросів. Сумарні натяги визначаються так:

$$T_1 = \frac{EF}{L}(\Delta L + u(l, t) \sin \beta), \quad T_2 = \frac{EF}{L}(\Delta L - u(l, t) \sin \beta). \quad (8)$$

Проекція реакцій тросів на вісь Ox має таке значення:

$$P = (T_1 + T_2) \cos \beta = -4T_0 \cos \beta. \quad (9)$$

Тут коефіцієнтом 4 враховано поздовжні реакції чотирьох тросів. Поперечні реакції тросів в площині Oxy запишемо як

$$F_i(t) = -(T_1 - T_2) \sin \beta = \frac{2EF}{L} u(l, t) \sin \beta \cos \beta \delta(x - l). \quad (10)$$

При цих позначеннях поздовжнє стискує навантаження на щоглу обчислюється так:

$$P(x) = - \int_0^l pgdx - 4T_0 \cos \beta, \quad (11)$$

а коефіцієнт

$$c_2 = \int_0^l P(x) X'(x) X(x) dx = -0,09995 mgl^3 - 4 \frac{EF\Delta l}{L} \cos \beta \frac{l^3}{21}. \quad (12)$$

Решта коефіцієнтів визначається так:

$$a = 0,06412 pl^3, \quad b = 0,06412 \alpha l^3, \quad c_1 = 0,8EI. \quad (13)$$

Рівняння коливань антенної щогли, розчалої тросами з урахуванням (12) і (13) зводиться до такого вигляду:

$$0,06412 l^3 (p\theta'' + \alpha\theta'') + (0,8EI + 0,25 \frac{EF}{L} \sin 2\beta l^4 - 0,1 pgl^4 - 0,2 \frac{EF\Delta l}{L} \cos \beta l^3) \theta(t) = q(t). \quad (14)$$

Оцінимо частоту власних коливань щогли з защемленим нижнім кінцем при відсутності тросів без урахування стискуючого навантаження власною вагою. В цьому випадку:

$$\omega = \sqrt{\frac{0,8EI}{0,06412 pl^4}} = 3,5886 \sqrt{\frac{EI}{pl^4}}. \quad (15)$$

Це значення частоти відрізняється від точного [3,4]

$$\omega_{\text{точн}} = 3,5156 \sqrt{\frac{EI}{pl^4}} \quad \text{на } 2\%.$$

Значення частоти коливань розчалої щогли визначається формулою:

$$\omega = \sqrt{\frac{0,8EI + 0,25EF \sin 2\beta l^2 - 0,1 pgl^4 - 0,2 \frac{EF\Delta l}{L} \cos \beta l^3}{0,06412 pl^5}}. \quad (16)$$

Умова втрати стійкості щогли від поздовжнього згину $\omega \equiv 0$. З формули (16) слідує, що значення частоти зменшується від поздовжнього навантаження власною вагою plq та від початкового натягу тросів

$$T_0 = \frac{EF\Delta L_0}{L}.$$

Розглянемо окремі випадки втрати стійкості щогли. Стійкість щогли без розчалення визначається умовою:

$$\omega = \sqrt{\frac{0,8EI - 0,1 pgl^4}{0,06412 pl^5}} = 0,$$

або

$$P = pgl = \frac{0,8EI}{0,1l^2} = \frac{8EI}{l^2}. \quad (17)$$

Точне значення граничного навантаження визначене академіком О.М. Динником [3] з використанням функцій Бесселя становить $P = 7,87EI/l^2$. таким чином отримані нами значення частоти та кінчної

стискуючої сили відрізняються від точного лише на $1 \div 2\%$. Умова стійкості щогли, навантаженої стискуючим зусиллям розчалювання має вигляд:

$$0,8EI + 0,25EF \sin 2\beta l^2 \geq 0,1 pgl^4 + 0,2EF \frac{\Delta L_0}{L} \cos \beta l^3. \quad (18)$$

Формулу (18) можна використати для вибору конструктивних параметрів щогли та розчалок EI та EF а також кутів нахилу розчалок β при заданій висоті щогли, оптимізації вагових та геометричних характеристик щогли.

При обчисленні параметрів ступінчастої щогли аналітична форма рівняння (14) зберігається, лише конкретизуються числові значення коефіцієнтів.

Висновок. Коливання та стійкість антенної щогли з урахуванням вітрового навантаження та пружних реакцій утримуючих тросів формулюються з застосуванням узагальнених функцій та аналізується методом Гальоркіна. Шляхом порівняння отриманих результатів з класичними отриманими в будівельній механіці встановлено високу точність отриманих розв'язків. Отримані формули можуть бути використані для оцінки частот коливань та стійкості антенної щогли, а також для оптимізації конструктивних параметрів антенної щогли.

Література

1. Савицкий Г.К. Основы проектирования антенных конструкций. – М.: Связь, 1973. – 112 с.
2. Флетчер К. Численные методы на основе метода Галёркина. – М.: Мир, 1988. – 352 с.
3. Динник А.Н. Продольный изгиб. – М.: ГОНТИ, 1939. – 75 с.
4. Пономарев С.Д., Бидерман В.Л. и др. Основы современных методов расчета на прочность в машиностроении. – М.: МАШГИЗ, 1952. – 862 с.

Надійшла до редакції 20.03.2006

УДК. 517.9

Володимир Я. Данілов,
Валентин В. Іщук,
Василь І. Кравець,
Вікторія В. Могильова

Volodimir Y. Danilov,
Valentin V. Ishchuk,
Vasil I. Kravez,
Viktoriya V. Mogylyova

**Умови асимптотичної
еквівалентності лінійних систем
різницевих рівнянь.**

**Conditions of asymptotic
equivalency of linear systems of
difference equations.**

Досліджено умови, при яких лінійні системи різницевих рівнянь асимптотично еквівалентні, що дозволяє з'ясувати поведінку розв'язків на нескінченності.

We consider conditions of asymptotic equivalency of linear systems of difference equations that allows to clarify behavior of solutions at infinity.

Ключові слова: асимптотична еквівалентність, лінійні різницеві рівняння, взаємно однозначна відповідність, обмеженість розв'язків.

Key words: asymptotic equivalency, linear difference equations, biunique correspondence, boundedness of solutions.

Вступ. Важливі результати, які пов'язані з питаннями асимптотичної поведінки розв'язків лінійних диференціальних систем одержані в роботах [1-2]. Відома теорема Левінсона Н. встановлює просту ознаку асимптотичної еквівалентності таких систем.

Теорема 1. (теорема Левінсона) [2]. Нехай розв'язки системи

$$\frac{dx}{dt} = Ax, \quad (0.1)$$

де A - стала $(n \times n)$ -матриця, обмежені на $[0, \infty)$. Тоді система

$$\frac{dy}{dt} = [A + B(t)]y, \quad (0.2)$$

де $B(t) \in C[0, \infty)$ і $\int_0^{\infty} \|B(t)\| dt < \infty$, ($\|\cdot\|$ -норма матриці) асимптотично еквівалентна системі (0.1).

Таким чином, про поведінку розв'язків на нескінченності судять, порівнюючи вихідну систему (0.2) з більш простою системою (0.1), встановлюючи при цьому взаємно однозначну відповідність між просторами розв'язків $x(t)$ і $y(t)$ вказаних систем.

Наша задача полягає у вивченні умов, при яких дві системи різницевих рівнянь будуть асимптотично еквівалентні, в лінійному випадку

Постановка задачі. Розглянемо в евклідовому просторі R^d дві системи різницевих рівнянь:

$$x_{n+1} = x_n + f_n(x_n), \quad (1)$$

$$y_{n+1} = y_n + g_n(y_n), \quad (2)$$

де $n = 0, 1, 2, \dots$, x_n, y_n – вектори із R^d , f_n і g_n , для кожного n , деякі функції із R^d в R^d .

Означення. Будемо говорити, що системи (1) і (2) є **асимптотично еквівалентні** при $n \rightarrow \infty$, якщо між їх розв'язками можна встановити взаємно однозначну відповідність, при якій для відповідних розв'язків x_n і y_n систем (1) і (2) справедливе граничне співвідношення

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - y_n| = 0, \quad (3)$$

де $|\cdot|$ – звичайна евклідова норма.

Розглянемо дві лінійні різницеві системи

$$x_{n+1} = x_n + Ax_n \quad (4)$$

і

$$y_{n+1} = y_n + (A + B_n)y_n, \quad (5)$$

де A – стала $(d \times d)$ -матриця, а B_n – змінна (залежна від n) $(d \times d)$ -матриця. Має місце наступна теорема.

Теорема 2. Якщо всі розв'язки системи (4) обмежені при $n = 0, 1, 2, \dots$, і виконується умова

$$\sum_{n=0}^{\infty} \|B_n\| < \infty, \quad (6)$$

(тут $\|\cdot\|$ – норма матриці), то системи (4) і (5) – асимптотично еквівалентні.

Доведення. Перш за все відмітимо, що для лінійної системи (4) обмеженість її розв'язків рівносильна стійкості такої системи. Оскільки система (4) є системою із сталими коефіцієнтами, то як відомо [3], всі власні числа матриці $E + A = \lambda_i$ такі, що $|\lambda_i| \leq 1$, причому власні числа, для яких $|\lambda_i| = 1$ мають прості елементарні дільники.

Дальше доведення теореми проводиться в декілька етапів.

1). Не зменшуючи загальності, можна вважати, що матриця $E + A$ має блочно-діагональний вигляд

$$E + A = \text{diag}(A_1, A_2), \quad (7)$$

де A_1 і A_2 відповідно, $(p \times p)$ і $(q \times q)$ матриці $(p + q = d)$ такі, що

$$|\lambda(A_1)| < \lambda < 1, \quad |\lambda(A_2)| = 1. \quad (8)$$

В протилежному випадку цього можна добитися невиродженим перетворенням $\xi = Sx, \eta = Sy$, де S – стала $(d \times d)$ матриця, причому взаємно однозначна відповідність між розв'язками ξ_n і η_n індукує взаємно

однозначну відповідність між відповідними розв'язками $x = S^{-1}\xi$ і $y = S^{-1}\eta$. Крім того, з граничного співвідношення $\xi_n - \eta_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$, очевидно, слідує граничне співвідношення $y_n - x_n \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$.

Із врахуванням цього, матрицант Ω_0^n системи (4) має вигляд

$$\Omega_0^n = \text{diag}(A_1^n, A_2^n).$$

Позначимо $I_1 = \text{diag}(E_p, O)$, $I_2 = \text{diag}(O, E_q)$, де E_p і E_q – одиничні матриці порядку p і q , при цьому, очевидно, $I_1 + I_2 = E$. Тоді

$$\Omega_0^n = X_1(n) + X_2(n),$$

де $X_1(n) = \Omega_0^n I_1 = \text{diag}(A_1^n, O)$, а $X_2(n) = \Omega_0^n I_2 = \text{diag}(O, A_2^n)$. З умови (8) слідує, що

$$\|X_1(n)\| \leq a\lambda^n \quad (9)$$

і

$$\|X_2(n)\| \leq b \quad (10)$$

при $n = 0, 1, 2, \dots$, a і b додатні числа.

2). Використовуючи метод варіації довільних сталих, запишемо систему (5) у вигляді

$$y_n = \Omega_{n_0}^n y_{n_0} + \sum_{k=n_0}^{n-1} X_1(n-1-k) B_k y_k + \sum_{k=n_0}^{n-1} X_2(n-1-k) B_k y_k.$$

Дальше, останнє рівняння перетворимо до вигляду

$$y_n = \Omega_{n_0}^n \left[y_{n_0} + \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0-k) B_k y_k \right] + \sum_{k=n_0}^{n-1} X_1(n-1-k) B_k y_k - \sum_{k=n}^{\infty} X_2(n-1-k) B_k y_k. \quad (11)$$

Ізоморфізм між розв'язками систем (4) і (5) будується таким чином. Оскільки розв'язки цих систем однозначно визначаються своїми початковими даними, то розв'язку системи (5) з початковою умовою y_{n_0} поставимо у відповідність розв'язок системи (4) з початковою умовою

$$x_{n_0} = y_{n_0} + \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0-k) B_k y_k. \quad (12)$$

Оскільки, розв'язки y_n і x_n повністю визначаються своїми початковими умовами, то формула (12) встановлює однозначну відповідність між розв'язками (4) і (5).

3). Доведемо, що відповідність (12) є взаємно однозначною. Нехай $Y_{n_0}^n$ – фундаментальна матриця системи (5), така що $Y_{n_0}^{n_0} = E$.

Маємо

$$Y_{n_0}^{n+1} = Y_{n_0}^n + (A + B_n) Y_{n_0}^n.$$

Звідси на основі методу варіації довільних сталих одержимо

$$Y_{n_0}^n = \Omega_{n_0}^n Y_{n_0}^{n_0} + \sum_{k=n_0}^{n-1} \Omega_{n_0}^{n-1-k} B_k Y_{n_0}^k.$$

Дальше, із нерівності (9) і (10) слідує оцінка

$$\|\Omega_{n_0}^n\| \leq \max(a, b) = c \text{ при } n \geq n_0,$$

і, отже, з використанням умови (6) і різницевого аналогу леми Гронуолла - Беллмана для сумарних нерівностей доводиться обмеженість всіх розв'язків системи (5), а отже і обмеженість її фундаментальної матриці:

$$\|Y_{n_0}^n\| \leq c + \sum_{k=n_0}^{n-1} c \|B_k\| \|Y_{n_0}^k\| \leq ce^{c \sum_{k=n_0}^{n-1} \|B_k\|} \leq ce^{c \sum_{k=0}^{\infty} \|B_k\|} \leq K, \text{ при } n_0 \leq n < \infty.$$

Оскільки $y_n = Y_{n_0}^n y_{n_0}$, то формула (12) набуде вигляду

$$x_{n_0} = \left(E + \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0 - k) B_k Y_{n_0}^k \right) y_{n_0}. \quad (13)$$

Але для $\sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0 - k) B_k Y_{n_0}^k$ справедлива оцінка

$$\left\| \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0 - k) B_k Y_{n_0}^k \right\| \leq \sum_{k=n_0}^{\infty} \|X_2(n_0 - k)\| \cdot \|B_k\| \cdot \|Y_{n_0}^k\| \leq bK \sum_{k=n_0}^{\infty} \|B_k\| \rightarrow 0, \quad n_0 \rightarrow \infty. \quad (14)$$

Тому для досить великого n_0

$$\det \left[E + \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0 - k) B_k Y_{n_0}^k \right] \neq 0, \quad (15)$$

що гарантує однозначність розв'язку співвідношення (13)

$$y_{n_0} = \left(E + \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n_0 - k) B_k Y_{n_0}^k \right)^{-1} x_{n_0}.$$

4) Далі для побудованих вище відповідних розв'язків оцінюється норма різниці x_n і y_n .

Оскільки $x_n = \Omega_{n_0}^n x_{n_0}$, де початкова умова x_{n_0} визначається формулою (13), то із (11) одержимо, що

$$y_n - x_n = \sum_{k=n_0}^{n-1} X_1(n-1-k) B_k y_k - \sum_{k=n_0}^{\infty} X_2(n-1-k) B_k y_k.$$

Звідси, з урахуванням нерівностей (9) і (10) не важко отримати оцінку

$$|x_n - y_n| \leq aK |y_{n_0}| \sum_{k=n_0}^{n-1} \lambda^{n-1-k} \|B_k\| + bK |y_{n_0}| \sum_{k=n_0}^{\infty} \|B_k\|.$$

З останньої оцінки випливає граничне співвідношення (3) $\lim_{n \rightarrow \infty} |x_n - y_n| = 0$, що і завершує доведення теореми 2.

З а у в а ж е н н я 1. Якщо $A_2 = 0$, то $X_2(n) = 0$ і ізоморфізм встановлюється співвідношенням $x_{n_0} = y_{n_0}$. В цьому випадку теорема тривіальна. Як наслідок, має місце наступне твердження.

Теорема 3. Нехай в системі

$$y_{n+1} = y_n + B_n y \quad (16)$$

матриця B_n задовольняє умові (6). Тоді для кожного розв'язку цієї системи існує границя

$$\lim_{n \rightarrow \infty} y_n = c. \quad (17)$$

Доведення даної теореми випливає із попередньої теореми, якщо в якості асимптотичної системи (4) вибрати систему $x_{n+1} = x_n$, всі розв'язки якої стали.

Ця теорема стверджує, що всі розв'язки y_n мають горизонтальні асимптоти, причому різні розв'язки мають різні горизонтальні асимптоти і, крім того, для кожної горизонтальної прямої $y = c$ існує розв'язок y_n , що має цю криву своєю асимптотою.

З а у в а ж е н н я 2. Якщо замість системи (5) розглянути нелінійну систему

$$y_{n+1} = y_n + A y_n + f_n(y_n), \quad (18)$$

де A – стала $(d \times d)$ -матриця, $f_n(y_n)$ – нелінійний член, що задовольняє умови:

$$\begin{aligned} 1) \quad & \|f_n(y_n)\| \leq k_n \|y_n\|, \\ 2) \quad & \sum_{n=0}^{\infty} \|k_n\| < \infty \end{aligned} \quad (19)$$

то можна показати, що має місце наступне твердження.

Теорема 4. Якщо всі розв'язки системи (4) обмежені при $n = 0, 1, 2, \dots$ і для системи (18) виконуються умови (19), то системи (4) і (18) – асимптотично еквівалентні.

Література

1. Демидович Б.П. Лекции по математической теории устойчивости / М.: Наука, 1967. – 472 с.
2. Brauer, Nonlinear differential equations with forcing terms, Proc. Amer. Math. Soc. 15, 5 (1964), – P.758-765.
3. Мартынюк Д.И. Лекции по качественной теории разностных уравнений / Киев: Наук. думка, 1972. – 246 с.

Надійшла до редакції 18.05.2006.

УДК 519.21

Д.О. Іваненко¹, А.П. Юрачківський²

Мартингальні методи оцінювання в моделі нелінійної авторегресії

Розглядається різницеве рівняння $\xi_k = f(\xi_{k-1}, a) + \varepsilon_k$, де (ε_k) квадратично інтегровна мартингал-різниця. Побудовано сім'ю оцінок $\tilde{a}_n$. Методами стохастичного аналізу доведено збіжність за розподілом при $n \rightarrow \infty$ $\sqrt{n}(\tilde{a}_n - a)$. Умова ергодичності і навіть стаціонарності на (ε_k) не накладається, відтак граничний розподіл може виявитись відмінним від нормального.

Ключові слова: авторегресія, мартингал, оцінка, збіжність.

¹Email: ida@univ.kiev.ua,

²Email: yap@univ.kiev.ua.

Нехай послідовність $(\xi_k, k \in \mathbb{N})$ задається рекурентним співвідношенням

$$\xi_k = f(\xi_{k-1}, a) + \varepsilon_k, \quad k \in \mathbb{N}, \quad (1)$$

де ξ_0 – задана випадкова величина, f – задана числова функція, a – невідомий числовий параметр, (ε_n) – квадратично інтегровна мартингал-різниця відносно деякого потоку σ -алгебр $(F_k, k \in \mathbb{Z}_+)$ такого, що випадкова величина ξ_0 F_0 -вимірна. Припущення про (ε_n) означає в розгорнутому вигляді, що ця послідовність (F_k) -узгоджена і для будь-якого $k \in \mathbb{N}$

$$E\varepsilon_k^2 < \infty, \quad (2)$$

$$E[\varepsilon_k | F_{k-1}] = 0. \quad (3)$$

Розподіл послідовності (ξ_k) залежить від a . На вибіркового імовірнісного просторі вона породжує не одну імовірнісну міру, а цілу сім'ю. Нижче P і E слід розуміти як P_a і E_a .

Позначимо $Q_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_k \xi_{k-1}$, $F_n(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f(\xi_{k-1}, a) \xi_{k-1}$. Відомо [1], що кожна відкрита множина в $\mathbb{R}$ є об'єднанням скінченної або зліченної

D.O. Ivanenko¹, A.P. Yurachkivsky²

Martingale methods of estimation in the nonlinear autoregression model

The difference equation $\xi_k = f(\xi_{k-1}, a) + \varepsilon_k$, where (ε_k) is a square integrable difference martingale, is considered. A family of estimators $\tilde{a}_n$ is constructed. Convergence in distribution of $\sqrt{n}(\tilde{a}_n - a)$ as $n \rightarrow \infty$ is proved with the use of stochastic calculus. Ergodicity and even stationarity of (ε_k) is not assumed, so the limiting distribution may be other than normal.

Key Words: autoregression, martingale, estimator, convergence.

сукупності неперетинних інтервалів. Узявши за кінці інтервалів випадкові величини, прийдемо до поняття випадкової відкритої множини в $\mathbb{R}$, значно елементарнішого ніж загальне поняття випадкової множини. Очевидно, індикатор такої множини є вимірною [2] випадковою функцією на $\mathbb{R}$. Введемо умову

(□) Існує послідовність (Γ_n) випадкових відкритих множин така, що на Γ_n існує однозначна обернена до F_n функція і для будь-якого не випадкового інтервалу Δ

$$\forall a \in \mathbb{R}, \lim_{n \rightarrow \infty} P_a \{ \Delta \subset \Gamma_n \} = 1.$$

За оцінку параметра a візьмемо

$$\bar{a}_n = F_n^{-1}(Q_n) I \{ Q_n \in \Gamma_n \}. \quad (4)$$

Цей вибір можна пояснити так. Домножимо (1) на ξ_{k-1} і візьмемо умовне відносно F_{k-1} сподівання. Зважаючи на (1) і (3), $E[\xi_k \xi_{k-1} | F_{k-1}] = f(\xi_{k-1}, a) \xi_{k-1}$, тож

$$F_n(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n-1} E[\xi_k \xi_{k-1} | F_{k-1}].$$

Замінивши праву частину рівності асимптотично близькою до неї при великих n випадковою величиною Q_n , приходимо до (4).

Досліджуємо асимптотику при $n \rightarrow \infty$ знормованого відхилу $\sqrt{n}(\bar{a}_n - a)$ оцінки параметра від його істинного значення. Оцінюванню параметра процесу авторегресії присвячено обширну літературу, див., наприклад, [3 – 5]. У цих роботах на шум (або навіть на сам процес [3]) накладаються умови ергодичності і (або) стаціонарності, що забезпечує нормальність досліджуваної статистики. Застосування ж методів стохастичного аналізу, яке лежить в основі нашого підходу, дозволяє обійтися без цих припущень, відтак граничний розподіл $\sqrt{n}(\bar{a}_n - a)$ може виявитись відмінним від нормального. В [6] для лінійної моделі було знайдено явно граничний розподіл знормованого відхилу оцінки найменших квадратів матричного параметра.

Нижче штрих означає диференціювання по a . Інші позначення:

$\varphi_n = F_n^{-1}$, $K_n = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^n \varepsilon_k \xi_{k-1}$, $H_n(a) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n f'(\xi_{k-1}, a) \xi_{k-1}$; $\xrightarrow{d}$ – слабка збіжність скінченновимірних розподілів, зокрема збіжність за розподілом випадкових величин, $\xrightarrow{c}$ – слабка збіжність розподілів випадкових процесів без розривів другого роду до розподілу неперервного процесу. З (1) маємо

$$K_n = \sqrt{n}(Q_n - F_n(a)). \quad (5)$$

Лема 1. Нехай f двічі неперервно диференційовна по другому аргументові. Тоді

$$\left| \tilde{a}_n - a - \varphi'_n(F_n(a)) \frac{1}{\sqrt{n}} K_n \right| \leq \frac{1}{2n} \sup_{0 \leq \beta \leq 1} \left| \varphi''_n \left(F_n + \frac{\beta}{\sqrt{n}} K_n \right) \right| K_n^2.$$

Доведення. Переписавши ліву частину нерівності у вигляді $|\varphi_n(Q_n) - \varphi_n(F_n) - \varphi'_n(F_n)(Q_n - F_n)|$ і перетворивши її за формулою Тейлора, дістанемо

$$\tilde{a}_n - a - \varphi'_n(F_n) \frac{1}{\sqrt{n}} K_n \leq \frac{1}{2} \varphi''_n(F_n + \beta(Q_n - F_n))(Q_n - F_n)^2, \quad \beta \in [0, 1],$$

після чого залишається врахувати (5). $\square$

Теорема 1. Нехай виконано умови леми 1 і умова (я); існують задані на спільному ймовірнісному просторі випадкова величина K і випадкові функції $F(t)$ і $H(u)$ такі, що $H(F(a)) \neq 0$,

$$(K_n, F_n, H_n) \xrightarrow{d} (K, F, H); \quad (6)$$

$$F_n \xrightarrow{c} F \quad (7)$$

у деякому околі точки a ,

$$H_n \xrightarrow{c} H \quad (8)$$

у деякому околі точки $F(a)$.

Тоді

$$\sqrt{n}(\tilde{a}_n - a) \xrightarrow{d} (H(F(a)))^{-1} K.$$

Доведення. Необхідне твердження методом спільного ймовірнісного простору виводимо безпосередньо з умов (6) – (8) і леми 1. $\square$

Для перевірки умов (6) – (8) встановимо деякі допоміжні результати.

Позначимо $E^0 = E_a[\dots | F_0]$, $\chi_k^N = I\{\xi_k^2 > N\}$, $I_k^N = I\{\varepsilon_k^2 > (1-q)N\}$, $b_k^N = E^0 \xi_k^2 \chi_k^N$, $\sigma_k^2 = E[\varepsilon_k^2 | F_{k-1}]$.

Лема 2. Нехай виконано умови (2), (3); існує стала q така, що для всіх x

$$|f(x, \cdot)| \leq q|x|. \quad (9)$$

Тоді для будь-якого натурального k

$$|\xi_k| \leq q^k |\xi_0| + \sum_{i=0}^{k-1} q^i |\varepsilon_{k-i}|.$$

Це очевидним чином випливає з (1) і (9).

Записавши на підставі (1)

$$\xi_k^2 = f(\xi_{k-1}, a)^2 + 2f(\xi_{k-1}, a)\varepsilon_k + \varepsilon_k^2, \quad (10)$$

виводимо за індукцією таке:

Лема 3. За умов леми 2

$$E^0 \xi_k^2 \leq q^{2k} \xi_0^2 + \sum_{i=0}^{k-1} q^{2i} E^0 \varepsilon_{k-i}^2.$$

Лема 4. Нехай виконано умови леми 2 і

$$q < 1. \quad (11)$$

Тоді для довільного k

$$b_k^N \leq q^2 b_{k-1}^N + E^0 \varepsilon_k^2 \chi_{k-1}^N + 2(q(1-q))^2 N^{-2} E^0 \xi_{k-1}^2 \sigma_k^2 + 2E^0 \varepsilon_k^2 I_k^N.$$

Доведення. З (1) і (9) маємо

$$\chi_k^N \leq \chi_{k-1}^N + I_k^N.$$

Помножимо обидві частини нерівності на ξ_k^2 і перетворимо праву частину згідно з (10). Відтак, усереднивши обидві частини одержаної нерівності відносно F_0 і скориставшись умовами (3), (9), дістанемо

$$b_k^N \leq q^2 b_{k-1}^N + E^0 \varepsilon_k^2 \chi_{k-1}^N + q^2 E^0 \xi_{k-1}^2 I_k^N + 2E^0 f(\xi_{k-1}, a) \varepsilon_k I_k^N + E^0 \varepsilon_k^2 I_k^N.$$

Залишається скористатись очевидними (не)рівностями

$$2ab \leq a^2 + b^2, \quad E^0 \xi_{k-1}^2 I_k^N = E^0 (\xi_{k-1}^2 P\{|\varepsilon_k| > (1-q)N \mid F_{k-1}\})$$

і нерівністю Чебишова. $\square$

Наступні твердження дозволяють спростити умову (6).

Позначимо

$$Y_n(t) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{[nt]} \varepsilon_k \xi_{k-1}, \quad G_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \sigma_k^2 \xi_{k-1}^2. \quad (12)$$

Очевидно, $K_n = Y_n(1)$. За побудовою і умовами (2), (3) Y_n локально квадратично інтегровний мартингал з квадратичною характеристикою

$$\langle Y_n \rangle(t) = n^{-1} [nt] G_{[nt]}. \quad (13)$$

Теорема 2. Нехай виконано умови (2), (3), (9) і (11);

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n E^0 \varepsilon_k^2 I\{|\varepsilon_k| > N\} = 0, \quad (14)$$

існують F_0 -вимірні випадкові величини ν і G такі, що для довільного натурального k

$$\sigma_k^2 \leq \nu, \quad (15)$$

$$G_n \xrightarrow{d} G. \quad (16)$$

Тоді $Y_n \xrightarrow{d} Y$, де Y – неперервний локальний мартингал з квадратичною характеристикою $\langle Y \rangle(t) = Gt$.

Доведення. З умов (14), (15) і леми 4 випливає, що з ймовірністю 1

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n b_k^N = 0. \quad (17)$$

Враховуючи (12) і (13) з наслідку в [8] маємо для довільного t

$$E \sup_{s \leq t} (Y_n(s) - Y_n(s-))^2 \rightarrow 0. \quad (18)$$

Міркування в [8] не зміняться при заміні безумовного середнього умовним відносно F_0 . Тому у (18) E і $\rightarrow$ можна замінити на E^0 і $\xrightarrow{P}$ відповідно. Еквівалентність цих співвідношень з огляду на (11) випливає з того, що

$$n^{-1} E^0 \max_{k \leq n} \rho_k \xrightarrow{P} 0,$$

де $\rho_k = \varepsilon_k^2 \xi_{k-1}^2$. Оскільки для довільного $\delta > 0$

$$\max_k \rho_k \leq \delta n + \sum_k \rho_k I\{\rho_k > \delta n\},$$

достатньо довести, що випадкові величини $\sqrt{\rho_k/n}$ задовольняють умовну відносно F_0 умову Ліндеберга, тобто для будь-якого $\delta > 0$

$$\frac{1}{n} \sum_{k \leq nt} E^0 \rho_k I\{\rho_k > \delta n\} \xrightarrow{P} 0. \quad (19)$$

записавши

$$\rho_k I\{\rho_k > \delta n\} (I\{|\xi_{k-1}| \leq N\} + I\{|\xi_{k-1}| > N\}) \leq N^2 \varepsilon_k^2 I\{\varepsilon_k^2 > N^{-2} \delta n\} + \varepsilon_k^2 \xi_{k-1}^2 \chi_{k-1}^N,$$

виводимо (19) із (17). $\square$

Застосувавши результат теореми 2 до складених процесів (Y_n, G_n) , де друга компонента не залежить від t , одержимо

Наслідок 1. Нехай виконано умови (2), (3), (9), (11), (14), (15); існують задані на спільному ймовірнісному просторі випадкова величина G і випадкові функції F, H такі, що виконуються співвідношення (7), (8) і

$$(G_n, F_n, H_n) \xrightarrow{d} (G, F, H). \quad (20)$$

Тоді $(Y_n, F_n, H_n) \xrightarrow{d} (Y, F, H)$, де Y — неперервний локальний мартингал відносно деякого потоку $(F(t), t \in \mathbb{R}_+)$ з квадратичною характеристикою $\langle Y \rangle(t) = Gt$, а функції F, H $F(0)$ -вимірні.

Лема 5. Нехай виконано умови леми 1; (2), (3), (9), (11), (14), (15); для будь-яких x, y_1, y_2 із $\mathbb{R}$

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq C(|x| + 1)|y_1 - y_2|, \quad (21)$$

$$|f'(x, y_1) - f'(x, y_2)| \leq C(|x| + 1)|y_1 - y_2|; \quad (22)$$

$$E\nu < \infty; \quad (23)$$

існують випадкові функції $H(u)$ і $F(t)$ такі, що

$$(H_n(u), F_n(t)) \xrightarrow{d} (H(u), F(t)). \quad (24)$$

Тоді виконано умови (7) і (8).

Доведення. З огляду на (24) необхідне твердження, враховуючи (21) – (23) випливає з лем 2, 3 і співвідношення (17). $\square$

З теореми 1, наслідку 1 і леми 5, враховуючи (5) отримаємо

Наслідок 2. Нехай виконано умови леми 5, (20) і $H(F(a)) \neq 0$ м. н.

Тоді

$$\sqrt{n}(\tilde{a}_n - a) \xrightarrow{d} (H(F(a)))^{-1} Y(1).$$

Зведемо умову (20) до простішої.

Позначимо $f_0(x) = x$ і для довільного $r \geq 1$

$$f_r(x_0, \dots, x_r) = f(f_{r-1}(x_0, \dots, x_{r-1}), a) + x_r. \quad (25)$$

Тоді очевидно

$$\xi_k = f_r(\xi_{k-r-1}, \xi_{k-r}, \dots, \xi_k), \quad r < k, \quad (26)$$

а за умовою (8)

$$|f_r(x_0, \dots, x_r)| \leq \sum_{i=0}^r q^i |x_{r-i}|. \quad (27)$$

Позначимо X_r вектор $(x_1, \dots, x_r)$.

Лема 6. Нехай виконано умови (9), (11) і для довільних x, y із $\mathbb{R}$

$$|f(x, \cdot) - f(y, \cdot)| \leq q|x - y|, \quad (28)$$

$$|f'(x, \cdot) - f'(y, \cdot)| \leq q|x - y|. \quad (29)$$

Тоді для будь-якого $N > 0$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sup_{|x| \leq N, X_r \in \mathbb{R}^r} |f(f_r(x, X_r), a)f_r(x, X_r) - f(f_r(0, X_r), a)f_r(0, X_r)| = 0, \quad (30)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sup_{|x| \leq N, X_r \in \mathbb{R}^r} |f'_2(f_r(x, X_r), a)f_r(x, X_r) - f'_2(f_r(0, X_r), a)f_r(0, X_r)| = 0, \quad (31)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sup_{|x| \leq N, X_r \in \mathbb{R}^r} |f_r(x, X_r)^2 - f_r(0, X_r)^2| = 0. \quad (32)$$

Доведення. З (26) і (27) за індукцією виводимо оцінку

$$|f_r(x, X_r) - f_r(y, X_r)| \leq q^r|x - y|, \quad x, y \in \mathbb{R},$$

звідки для довільного N

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \sup_{|x| \leq N, X_r \in \mathbb{R}^r} |f_r(x, X_r) - f_r(0, X_r)| = 0,$$

що разом з (9), (11), (28) і (29) доводить твердження леми. $\square$

Позначимо далі

$$\xi_k^r = f_r(0, \varepsilon_{k-r+1}, \dots, \varepsilon_k), \quad F_n^r = \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n f(\xi_k^r, a)\xi_k^r, \quad H_n^r = \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n f'(\xi_k^r, a)\xi_k^r,$$

$$G_n^r = \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n (\xi_k^r)^2 \sigma_k^2.$$

Лема 7. Нехай виконано умови (2), (3), (9), (11), (14), (15), (28) і (29).

Тоді майже напевне

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} E^0 |G_n^r - G_n| = 0, \quad (33)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} E^0 |H_n^r - H_n| = 0, \quad (34)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} E^0 |F_n^r - F_n| = 0. \quad (35)$$

Доведення. За лемою 6 для довільного $N > 0$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} E |f(\xi_k^r, a)\xi_k^r - f(\xi_k, a)\xi_k| I\{|\xi_k| \leq N\} = 0. \quad (36)$$

З (9) маємо $E^0 |f(\xi_k^r, a)\xi_k^r| \chi_k^N \leq q^2 b_k^N$, звідки, враховуючи (17)

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} E^0 |f(\xi_k^r, a)\xi_k^r| \chi_k^N = 0. \quad (37)$$

Далі з умов (9) і (27)

$$E |f(\xi_k^r, a)\xi_k^r| \chi_k^N \leq q E \left(\sum_{i=0}^{r-1} q^i |\varepsilon_{k-i}| \right)^2 \chi_k^N. \quad (38)$$

Записавши нерівність Коші – Буняковського

$$\left(\sum_{i=0}^{r-1} q^i |\varepsilon_{k-i}| \right)^2 \leq \sum_{j=0}^{r-1} q^j \sum_{i=0}^{r-1} q^i \varepsilon_{k-i}^2,$$

отримаємо для будь-якого $L > 0$

$$E\left(\sum_{i=0}^{r-1} q^i |\varepsilon_{k-i}|^2\right) \chi_k^N \leq (1-q)^{-1} \left(E \sum_{i=0}^{r-1} q^i \varepsilon_{k-i}^2 I\{|\varepsilon_{k-i}| > L\} + L^2 P\{|\xi_k| > N\} \sum_{i=0}^{r-1} q^i \right). \quad (39)$$

З леми 3, (11) і (15) маємо

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n P\{|\xi_k| > N\} = 0. \quad (40)$$

Очевидно, що для довільних невід'ємних чисел $u_0, \dots, u_{r-1}, v_1, \dots, v_{n-1}$

$$\sum_{k=r}^{n-1} \sum_{i=0}^{r-1} u_i v_{k-i} \leq \sum_{i=0}^{r-1} u_i \sum_{j=1}^{n-1} v_j,$$

звідки, враховуючи (11) і (14) виводимо

$$\limsup_{L \rightarrow \infty} \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=r}^{n-1} E \sum_{i=0}^{r-1} q^i \varepsilon_{k-i}^2 I\{|\varepsilon_{k-i}| > L\} = 0,$$

що разом з (38) – (40) доводить (35). Аналогічно доводяться (33) і (34). $\square$

Наслідок 3. Нехай виконано умови леми 5 і для довільного натурального r існує трійка (F^r, H^r, G^r) така, що

$$(G_n^r, F_n^r, H_n^r) \xrightarrow{d} (G^r, F^r, H^r) \text{ при } n \rightarrow \infty. \quad (41)$$

Тоді послідовність $((F^r, H^r, G^r), r \in \mathbb{N})$ збігається за розподілом до деякої границі (F, H, G) і умова (20) виконана.

Зауваження. За умов наслідку 3 F і H з теореми 1 мають вигляд $F(t) = \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n f(\xi_k^r, t) \xi_k^r$, $H(u) = \lim_{r \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n f_2(\xi_k^r, u) \xi_k^r$. Оскільки за побудовою $F'(t) = H(t)$, то за умови неперервності F на $B(a)$ (ця умова вкладається в умову неперервності H) і $H(u) \neq 0, u \in B(F(a))$ до F застосовна теорема про обернену функцію. Отже існує з прямуючою до одиниці ймовірністю обернена до F_n функція. Ідея такого формулювання запозичена в [9].

Треба зазначити, що на практиці окіл істинного значення параметра a невідомий, але з доведених вище тверджень, очевидно $\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_k \xi_{k-1}$ попаде

в $B(F(a))$, а $F_n^{-1}\left(\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \xi_k \xi_{k-1}\right)$ в $B(a)$ з прямуючою до одиниці ймовірністю.

У [3], як було зазначено у вступі, була доведена асимптотична нормальність оцінки найменших квадратів невідомого параметра в нелінійній моделі авторегресії за умови метричної транзитивності і строгої стаціонарності самого процесу. Крім того на f накладались більш обмежливіші умови. Випишемо для порівняння вирази дисперсій граничного для $\sqrt{n}(\hat{a}_n - a)$ нормального розподілу отриманого в [3] і за тих самих умов в цій статті

$$\frac{E(f_2'(\xi_0, a) \varepsilon_1)^2}{(E(f_2'(\xi_0, a))^2)^2}, \frac{E \xi_0^2 \varepsilon_1^2}{(E f_2'(\xi_0, a) E f(\xi_0, a) \xi_0)^2}.$$

Приклад

Нехай двічі неперервно диференційовна функція f задовольняє умови (9), (11), (21), (22), (28), (29); $\varepsilon_k = \gamma_k \chi_k$, де (γ_k) і (χ_k) незалежні послідовності випадкових величин, χ_k – незалежні однаково розподілені, $|\gamma_k| \leq C$, для довільного $r \in \mathbb{N}$ і обмеженої борелівської функції g послідовність

$$\left(\frac{1}{n} \sum_{k=r}^{n-1} g(\gamma_{k-r+1}, \dots, \gamma_k), n = r, r+1, \dots \right)$$

збігається за ймовірністю; $E\chi_1 = 0$, $E\chi_1^2 = 1$.

За F_k візьмемо σ -алгебру, породжену $(\xi_0; \chi_1, \dots, \chi_k, \gamma_1, \gamma_2, \dots)$ (таким чином уся послідовність (γ_k) F_0 -вимірна). Звідси $\sigma_k^2 = \gamma_k^2$,

$$G_n^r = \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n \gamma_k^2 (\xi_k^r)^2 \quad (42)$$

і виконуються умови (2), (3), (15) і (24). Умова (14) випливає з рівномірної обмеженості γ_k і однакової розподіленості χ_k .

Покажемо, що G_n^r , H_n^r і F_n^r задовольняють (41).

Доведемо збіжність за ймовірністю послідовності (G_n^r) , збіжність (H_n^r) і (F_n^r) доводиться аналогічно.

Позначимо доданки в правій частині (42) $\alpha_k = \alpha(\bar{\gamma}_k, \chi_{k-r+1}, \dots, \chi_k)$, де $\bar{\gamma}_k = (\gamma_{k-r+1}, \dots, \gamma_k)$.

За теоремою Стоуна – Вейерштрасса α можна рівномірно на кожному компактi наблизити скінченними лінійними комбінаціями функцій виду $h(y)h_1(x_1) \dots h_r(x_r)$ ($y \in \mathbb{R}^r$, $x_i \in \mathbb{R}$). За вибором F_k і умовами на (γ_k) і (χ_k)

$$E^0 h(\bar{\gamma}_k) h_1(\chi_{k-r+1}) \dots h_r(\chi_k) = h(\bar{\gamma}_k) \prod_{i=1}^r E h_i(\chi_i). \quad (43)$$

Звідси і з нерівності Чебишова

$$\frac{1}{n} \sum_{k=r}^n (\alpha_k - E^0 \alpha_k)^2 \xrightarrow{P} 0,$$

а з умов на (γ_k) і (43) випливає, що послідовність $\left(\frac{1}{n} \sum_{k=r}^{n-1} E^0 \alpha_k, n = r, r+1, \dots \right)$ збігається за ймовірністю.

Отже, якщо $H(F(a)) \neq 0$ то умови наслідку 2 виконано. Якщо ж границя $\text{l.i.p.} \frac{1}{n} \sum_{k=r}^n g(\bar{\gamma}_k)$ випадкова, то граничний розподіл досліджуваної статистики може виявитись відмінним від нормального.

Література

1. А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. Элементы теории функций и функционального анализа. М.: Наука, 1989. – 624 с.
2. И.И. Гихман, А.В. Скороход. Введение в теорию случайных процессов. М.: Наука, 1977. – 568 с.
3. А.Я. Дороговцев. Теория оценок параметров случайных процессов. К.: Изд.-во при Киев. ун.-те., – 1982.
4. Т. Андерсон Статистический анализ временных рядов. М.: Мир, – 1976.
5. И. Вучков, Л. Бояджиева, Е. Солаков Прикладной линейный регрессионный анализ. М.: Финансы и статистика, – 1987.
6. А.П. Юрачківський, Д.О. Іваненко Оцінювання матричного параметра процесу авторегресії з нестационарним шумом // Теорія ймовірностей і математична статистика. – 2005. – № 72. – с. 158-172.
7. Р.Ш. Липцер, А.Н. Ширяев. Теория мартингалов. М.: Наука, – 1986.
8. А.Р. Yurachkivsky. Conditions for convergence of a sequence of martingales in terms of their quadratic characteristics // Доп. Нац. Акад. наук України, – 2003. – № 1, с. 33 – 36.
9. A.G. Kukush, Y. Chernikov, D. Pfeifer. Maximum likelihood estimators in a statistical model of natural catastrophe claims with trend //Extremes, – 2004. – vol. 7, №4, p. 309 – 337.

Надійшла до редакції 06.03.2006

УДК 539.374

Іван Ф. Киричок,
Олена В.П'ятецька,
Максим В.Карнаухов

Ivan F.Kirichok,
Olena V.Pyatetska,
Maksym V.Karnaukov

Згинні коливання та дисипативний розігрів кільцевої в'язкопружної пластинки з п'єзоелектричними актуаторами при електромеханічному моногармонічному навантаженні

Bending vibrations and dissipative heating of viscoelastic circular plate with piezoelectrical actuators under electromechanical monoharmonic loading

Розглядається зв'язана задача про згинні коливання та дисипативний розігрів кільцевої в'язкопружної пластинки з п'єзокерамічними актуаторами при електромеханічному моногармонічному навантаженні. Враховується температурна залежність комплексних характеристик пасивного і п'єзоактивного матеріалів. Нелінійна задача розв'язується ітераційним методом в поєднанні з чисельними методами. Досліджується вплив температури дисипативного розігріву на активне демпфірування вимушених резонансних коливань кругової пластинки при дії рівномірного поперечного гармонічного тиску.

Coupled problem of vibrations and dissipative heating circular viscoelastic plate with piezoceramic actuators under monoharmonic electromechanic loads is considered. Temperature dependence of complex characteristics of passive and active materials is taken into account. Nonlinear problem are solved by iterative and numerical methods. The influence of temperature of the dissipative heating on the active damping forced resonant vibrations of circular plate with the use of piezoelectric actuators is investigated under the action of a uniform transverse harmonic loads.

Key words: forced vibrations, dissipative heating, actuator, temperature, damping.

Ключові слова: вимушені коливання, дисипативний розігрів, актуатор, температура, демпфірування.

Вступ. В сучасній техніці для обмеження амплітуд вимушених коливань тонкостінних елементів конструкцій при механічних гармонічних навантаженнях використовуються зовнішні або внутрішні включення у вигляді тонких шарів із п'єзоактивного матеріалу (актуатори). До останніх підводиться різниця електричних потенціалів відповідної амплітуди і фази з частотою механічного навантаження [1 - 5]. Керуючи амплітудою та фазою електричного збудження, можна підсилювати або зменшувати (аж до повного гасіння) амплітуду механічних коливань найбільш енергоємних мод. Одним з важливих факторів, який може суттєво вплинути на ефективність демпфірування механічних коливань тонкостінного елементу, являється температурна чутливість в'язкопружних характеристик пасивного та п'єзоактивного матеріалів. Зміна температури може бути обумовлена взаємодією елемента з зовнішнім середовищем і дисипативним розігрівом через внутрішні втрати в матеріалах [4].

Температурні ефекти особливо важливі при дослідженні коливальних процесів в елементах із полімерних матеріалів та композитів на їх основі [5]. Перші результати по дослідженню впливу температури дисипативного розігріву на демпфірування стаціонарних коливань круглих пластин за допомогою п'єзоактивних сенсорів та актуаторів одержано в статтях [2 - 4]. В статті [4] вперше досліджується вплив температури на ефективність демпфірування вимушених механічних коливань в'язкопружної круглої пластинки за допомогою п'єзоелектричних актуаторів, нанесених на її поверхні. Втрати в п'єзоактивному і вплив актуатора на жорсткісні характеристики не враховуються. Припускається лінійна температурна залежність комплексного модуля зсуву пасивного матеріалу пластинки. На основі аналітичного розв'язку отримано формулу для температури дисипативного розігріву і різниці потенціалів, яку необхідно підвести до актуатора для повного демпфірування першої форми згинних механічних коливань.

В даній статті розглядаються вимушені згинні коливання і дисипативний розігрів тришарової кільцевої пластинки, складеної з в'язкопружних пасивного та нанесених на його поверхні п'єзоактивних шарів (актуаторів). На пластинку діє поверхневе механічне навантаження, що гармонічно змінюється в часі, а до актуаторів підведена різниця потенціалів, яка змінюється з тією ж частотою. Досліджується вплив геометричних розмірів актуатора на термомеханічну поведінку пластинки та вплив температури дисипативного розігріву на ефективність демпфірування вимушених механічних коливань за допомогою розподілених п'єзоелектричних актуаторів.

Постановка задачі. Розглядається тришарова кільцева пластинка з внутрішнім $r = r_1$ та зовнішнім $r = r_2$ радіусами. Середній шар товщини h , який виготовлено з в'язкопружного пасивного матеріалу, жорстко скріплений на зовнішніх $z = \pm h/2$ площинах з п'єзокерамічними актуаторами однакової товщини δ та радіусом $r_1 \leq r \leq r_2$. Актуатори мають протилежний напрямок поляризації, через що в пластинці виникають чисто згинні коливання. На зовнішні поверхні п'єзошарів, а також між ними і пасивним шаром нанесені нескінченно тонкі електроди. На поверхню пластинки діє осесиметричний тиск, що змінюється в часі за гармонічним законом $P = P_0 \cos \omega t$ з круговою частотою ω , що близька до резонансної. Крім того, до зовнішніх електродів підводиться різниця електричних потенціалів $\psi(h/2 + \delta) - \psi(-h/2 - \delta) = \text{Re}(2V_0 e^{i\omega t})$. Внутрішні електроди підтримуються при нульовому потенціалі. В'язкопружна поведінка пасивного і п'єзоактивного матеріалів описується концепцією комплексних модулів, що довільно залежать від температури дисипативного розігріву. На зовнішніх площинах та торцях пластинки реалізуються умови конвективного теплообміну з температурою T_c .

середовища. Моделювання електромеханічної поведінки розглядуваної пластинки ґрунтується на справедливості по всьому пакету шарів гіпотез Кірхгофа - Лява відносно механічних величин та аналогічних допущень для електричних змінних [6]. Згідно [6] складова вектора електричної індукції D_z в напрямку поляризації не залежить від товщинної координати z , а складовими в площині пластинки можна знехтувати. Вважається, що температура дисипативного розігріву постійна по всій товщині пластинки.

В результаті цих припущень та в силу способу навантаження і симетрії геометрії пластинки її електромеханічна поведінка описується системою диференціальних рівнянь вимушених гармонічних коливань згину (множник $e^{i\omega t}$ опускається)

$$\frac{d}{dr}(rQ_r) + \rho \bar{h} r \omega^2 w + rP_0 = 0; \quad \frac{d}{dr}(rM_r) - M_r - M_\theta - rQ_r = 0; \quad (1)$$

співвідношеннями електров'язкопружності

$$M_r = D_{11}\kappa_r + D_{12}\kappa_\theta + M_E, \quad M_\theta = D_{12}\kappa_r + D_{11}\kappa_\theta + M_E; \quad (2)$$

залежностями між згинними деформаціями та переміщеннями

$$\kappa_r = \frac{d\vartheta}{dr}, \quad \kappa_\theta = \frac{\vartheta}{r}, \quad \vartheta = -\frac{dw}{dr}; \quad (3)$$

електростатичними виразами

$$E_z = -\frac{V_0}{\delta} + \frac{b_{31}}{b_{33}} \left(\frac{h+\delta}{2} \pm z \right) \kappa \left(-\frac{h}{2} - \delta \leq z \leq -\frac{h}{2}; \frac{h}{2} \leq z \leq \frac{h}{2} + \delta \right), \quad (4)$$

$$D_z = -b_{33} \frac{V_0}{\delta} + b_{31} \frac{h+\delta}{2} \kappa, \quad \kappa = \kappa_r + \kappa_\theta;$$

усередненим за цикл коливань і по товщині пакету рівнянням енергії

$$\frac{1}{a} \frac{dT}{dr} = \frac{d^2 T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} - \frac{2\alpha_s}{\lambda H} (T - T_c) + \frac{1}{\lambda H} \bar{W} \quad (5)$$

з дисипативною функцією

$$\begin{aligned} \bar{W} = & D_{11}'' (\kappa_r'^2 + \kappa_r''^2 + \kappa_\theta'^2 + \kappa_\theta''^2) + 2D_{12}'' (\kappa_r' \kappa_\theta' + \kappa_r'' \kappa_\theta'') + \\ & + 2(h+\delta)b_{31} (\kappa' V_0' + \kappa'' V_0'') + \frac{2}{\delta} b_{33}'' (V_0'^2 + V_0''^2) \end{aligned} \quad (6)$$

Механічні граничні умови приймаються такими:

$$w = \vartheta = 0 \quad (r = r_1); \quad w = M_r = 0 \quad (r = r_2). \quad (7)$$

Теплові граничні та початкові умови мають вигляд:

$$\frac{dT}{dr} = \pm \frac{\alpha_{1,2}}{\lambda} (T - T_c) \quad (r = r_1, r = r_2); \quad T = T_0 \quad (t = 0). \quad (8)$$

В рівняннях (1) - (8) приймаються такі позначення:

$$D_{11} = \frac{1}{12} (c_{11}h^3 + 2c_{12}^E\delta_*^3 + 2\gamma_{31}\delta^3), \quad D_{12} = \frac{1}{12} (c_{12}h^3 + 2c_{12}^E\delta_*^3 + 2\gamma_{31}\delta^3)$$

$$c_{11} = \frac{E}{1-\nu^2}; \quad c_{11}^E = \frac{1}{s_{11}^E(1-\nu_E^2)}; \quad \gamma_{31} = \frac{b_{31}^2}{b_{33}}; \quad c_{12} = \nu c_{11}; \quad c_{12}^E = \nu_E c_{11}^E;$$

$$\nu_E = -\frac{s_{12}^E}{s_{11}^E}; \quad b_{31} = \frac{d_{31}}{s_{11}^E(1-\nu_E)}; \quad k_p^2 = \frac{2d_{31}^2}{\varepsilon_{33}^T s_{11}^E(1-\nu_E)}; \quad b_{33} = \varepsilon_{33}^T (1-k_p^2) \quad (9)$$

$$\delta_*^3 = 4\delta^3 + 6\delta^2 h + 3\delta h^2; \quad \rho h = \rho h + 2\rho_*\delta; \quad M_E = b_{31}(h + \delta)V_0;$$

$$E(T) = E' + iE''; \quad s_{11}^E(T) = s_{11}'[1 - i\delta_{12}]; \quad d_{31}(T) = d_{31}'[1 - i\delta_{31}];$$

$$s_{12}^E(T) = s_{12}'[1 - \delta_{12}]; \quad \varepsilon_{33}^T(T) = \varepsilon_{33}'[1 - i\delta_{33}]; \quad H = h + 2\delta;$$

$w = w' + iw''$ - комплексна амплітуда переміщення згину; Q_r, M_r, M_θ - аналогічні величини перерізуючої сили, радіального і кругового моментів; E, ν - модуль Юнга і коефіцієнт Пуасона пасивного матеріалу; $s_{11}^E, s_{12}^E, d_{31}, \varepsilon_{33}^T$ - відповідно податливості, п'єзомодуль і діелектрична проникливість п'єзокераміки; ρ, ρ_* - густина пасивного і п'єзоактивного матеріалів; $\alpha_S, \alpha_{1,2}$ - коефіцієнти теплообміну на граничних поверхнях; λ, a - коефіцієнти тепло - і теплопровідності. Одним і двома штрихами позначаються дійсна і уявна складові комплексної величини. Крім того, в співвідношеннях (4), (6) врахована та обставина, що п'єзомодуль d_{31} в п'єзошарах має протилежні знаки.

Методика розв'язку задачі. При врахуванні залежності комплексних характеристик пасивного і п'єзоактивного матеріалів від температури дисипативного розігріву система диференціальних рівнянь (1) - (6) буде зв'язаною і нелінійною. Для її розв'язку використовується покроковий за часом метод інтегрування [6]. Для цього співвідношення електромеханіки (1) - (4), (7) записуються у формі звичайних диференціальних рівнянь нормального вигляду

$$\frac{d\vec{Y}}{dr} = [A]\vec{Y} + \vec{B} \quad (10)$$

при граничних умовах

$$B_1\vec{Y} = 0 \quad (r = r_1); \quad B_2\vec{Y} = 0 \quad (r = r_2), \quad (11)$$

де $\vec{Y}^T = \{y_1, y_2, y_3, y_4\} = \{w, \vartheta, M_r, Q\}$ - шукана комплекснозначна вектор-функція; $[A]$ - комплекснозначна квадратна матриця, відмінні від нуля елементи якої є

$$a_{12} = -1, \quad a_{22} = \frac{\nu_D}{r}, \quad a_{23} = J_D, \quad a_{32} = D_{11}(1 - \nu_D^2)/r^2, \quad J_D = 1/D_{11},$$

$$a_{33} = (1 + \nu_D)/r, \quad a_{34} = 1, \quad a_{41} = -\rho \bar{h} \omega^2, \quad a_{44} = -\frac{1}{r}, \quad \nu_D = -J_D D_{12};$$

$\bar{B}^T = \{0, -J_D M_E, -(1 + \nu) M_E / r, P_0\}$ - комплекснозначний вектор - стовпчик; B_1, B_2 - комплекснозначні прямокутні матриці, ненульові елементи яких визначаються заданими механічними умовами (7). З використанням безрозмірних просторової координати $x = (r - r_1)/L$ та часу $\tau = at/L^2$ ($L = r_2 - r_1$) на кожному кроці за часом крайова задача електромеханіки (10), (11) розв'язується методом дискретної ортогоналізації [8]. Для інтегрування рівнянь нестационарної теплопровідності застосовується явна схема методу кінцевих різниць.

Розглядаються три способи навантаження. Згідно з першим коливання збуджуються рівномірним поверхневим тиском, що змінюється за часом по гармонічному закону. При другому способі навантаження задається на поверхнях актуатора різниця електричних потенціалів, яка змінюється з тією ж частотою, що і тиск. При третьому комбінованому способі навантаження пластина знаходиться під дією поверхневого гармонічного тиску і з метою його компенсації до поверхней актуатора підводиться різниця електричних потенціалів з тією ж частотою та протилежною фазою.

З метою визначення оптимального значення електричного потенціалу V_A для повного демпфірування вимушених коливань, що обумовлюються механічним навантаженням P_0 , залежність між ними вибирається у вигляді лінійного закону

$$V_A = k_A P_0, \quad (12)$$

де k_A - комплексний коефіцієнт керування.

Коефіцієнт k_A вибирається як відношення максимального прогину $w_P(x = 0,5)$, обумовленого на частоті лінійного резонансу одиничним механічним навантаженням ($P_0 = 1 \text{ Па}$), до відповідного прогину $w_E(x = 0,5)$ при підведенні до актуатора одиничного електричного потенціалу ($V_0' = 1 \text{ В}$, $V_0'' = 0$), так що

$$k_A = -\frac{w_{P \max}}{w_{E \max}}. \quad (13)$$

Це відношення витікає із умови еквівалентності амплітуд прогинів, що збуджуються незалежно одиничними протифазними механічним і електричним навантаженнями для повного демпфірування коливань. Протифазність електричного навантаження враховується знаком "мінус" в (13).

Результати розрахунків. Числові розрахунки проведено для пластинки із полімеру [9], у якого температурна залежність складових комплексного модуля зсуву характеризується лінійними функціями

$$G' = 968 - 8,69T [\text{МПа}], G'' = 87,1 - 0,7T [\text{МПа}] (20^\circ \text{C} \leq T \leq 80^\circ \text{C}). \quad (14)$$

Зовнішні п'єзоактивні шари актуатора виготовлено з п'єзокераміки ЦТСТБС-2 [10] з залежними від температури модулями (9), що мають вигляд:

$$\begin{aligned} s'_{11} &= s_{11}^0 (1 + 0,3077 \cdot 10^{-3} \theta), d'_{31} = d_{31}^0 (1 + 0,219 \cdot 10^{-2} \theta), \delta_{11} = \delta_{11}^0 (1 + \\ &+ 0,6155 \cdot 10^{-3} \theta + 0,41575 \cdot 10^{-4} \theta^2); \delta_{31} = \delta_{31}^0 (1 + 1,198 \cdot 10^{-2} \theta + \\ &+ 1,823 \cdot 10^{-4} \theta^2); \epsilon'_{33} = \epsilon_{33}^0 (1 + 0,111 \cdot 10^{-3} \theta + 0,84256 \cdot 10^{-4} \theta^2); \\ \delta_{33} &= \delta_{33}^0 (1 + 0,0119 \theta + 0,119 \cdot 10^{-3} \theta^2), s_{11}^0 = 12,5 \cdot 10^{-12} \text{ м/Н}^2; \\ d_{31}^0 &= -1,6 \cdot 10^{-10} \text{ Кл/м}; \epsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ Ф/м}; \delta_{11}^0 = 0,16 \cdot 10^{-2}; \\ \delta_{31}^0 &= 0,4 \cdot 10^{-2}; \epsilon_{33}^0 = 21 \cdot 10^2 \epsilon_0; \theta = T - T_r; T_r = 20^\circ \text{C}. \end{aligned}$$

Інші параметри полімеру і п'єзокераміки наступні:

$$\begin{aligned} \rho &= 929 \text{ кг/м}^3; \rho_* = 7520 \text{ кг/м}^3; \nu = \nu' = 0,3636 (\nu'' = 0); \\ \nu_E &= \nu'_E = 0,37 (\nu''_E = 0); \alpha_S = 2 \text{ Вт/(м}^2 \cdot \text{град)}; \alpha_1 = 0; \\ \alpha_2 &= \alpha_S; \lambda = 0,47 \text{ Вт/(м/град)}; T_c = T_0 = 20^\circ \text{C}. \end{aligned}$$

Геометричні розміри пластинки такі: $r_1 = 0,05 \text{ м}$; $r_2 = 0,2 \text{ м}$; $h = 0,01 \text{ м}$.

На Рис. 1 в залежності від величини радіуса актуатора $x_0 = (r_0 - r_1)/L$ приведені криві залежності частоти ω_p лінійного резонансу першої згинної форми коливань пластинки (лінії з хрестиками); розрахованих на цих частотах максимальних амплітуд $|w| = (w'^2 + w''^2)^{1/2}$ в точці з координатою $x = 0,5$ прогинів $w_p = |w| \cdot 10^4 / h$ (штрихові лінії), викликаних зовнішнім тиском $P_0 = 1 \text{ Па}$, та прогинів $w_E = |w| \cdot 10^3 / h$ (лінії з крапками), обумовлених підведеним до актуатора електричним потенціалом $|V_0| = 1 \text{ В}$ ($V_0'' = 0$). Суцільні криві характеризують зміну розрахованої за формулами (12), (13) величини амплітуди $|V_A| = (V_A'^2 + V_A''^2)^{1/2}$ електричного потенціалу для компенсації гармонічних механічних коливань, обумовлених поверхневим тиском $P_0 = 1 \text{ Па}$. Ці криві еквівалентні залежності амплітуди коефіцієнта керування k_A (13) від відносних величин радіуса x_0 та відносної товщини $\delta_0 = 2\delta/h$ актуатора. Результати на Рис. 1 отримані при ізотермічних характеристиках пасивного і п'єзоактивного матеріалів ($T = T_r$). Тут криві 1 відповідають розрахункам для нескінченно тонкого актуатора без врахування його товщини, а криві 2 - для актуатора відносної товщини $\delta_0 = 0,01$ з її врахуванням в жорсткісних коефіцієнтах. Проведені розрахунки та криві 1 показують,

що впливом товщини актуатора на динамічні характеристики при вимушених коливаннях розглядуваних пластинок можна знехтувати для

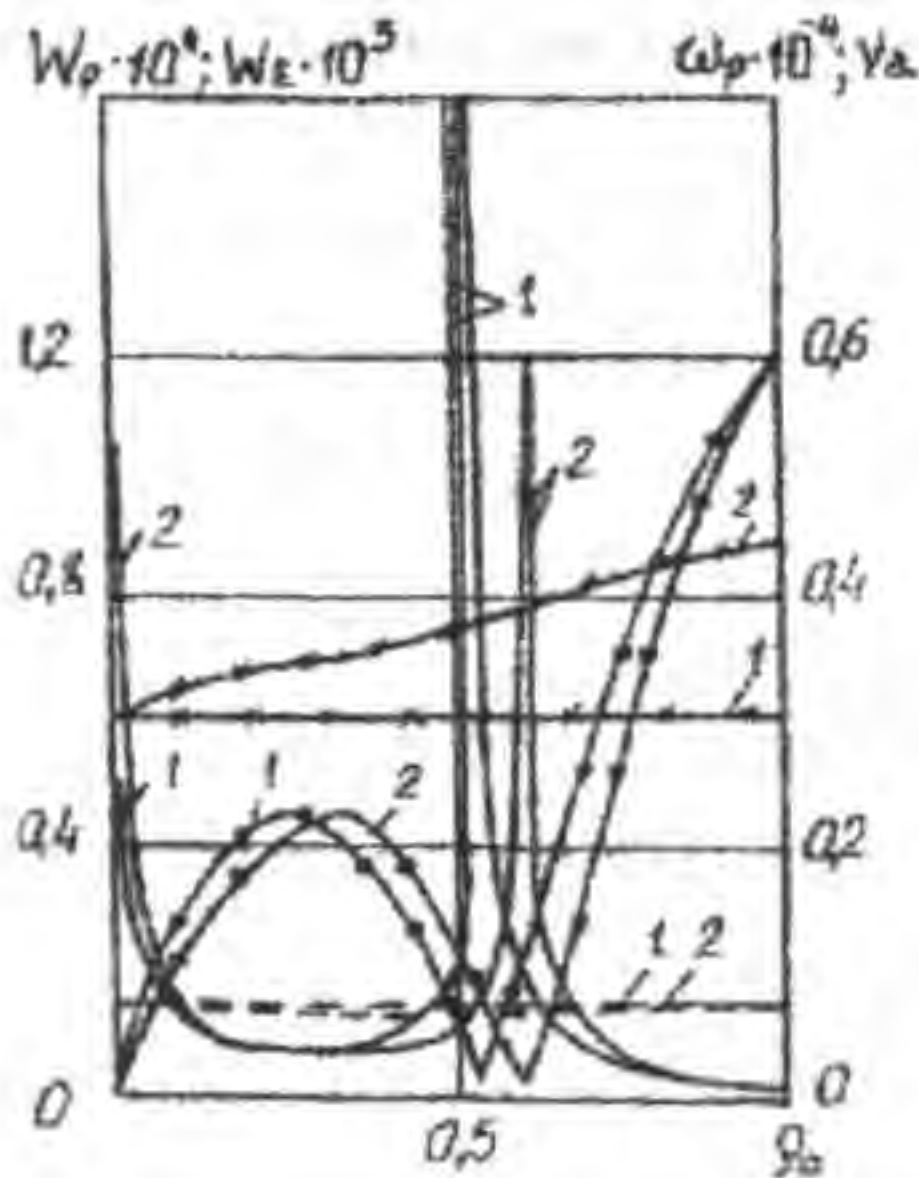


Рис. 1

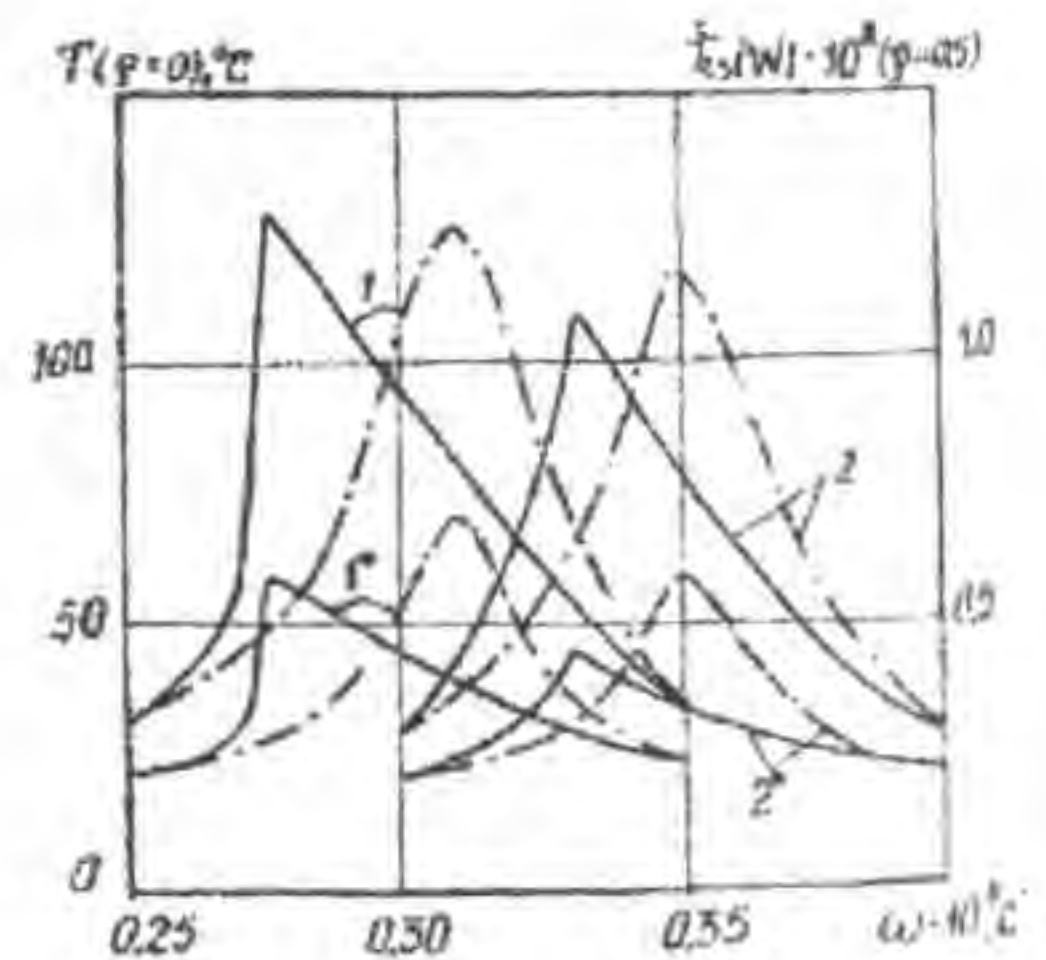


Рис. 2

відносних товщин $\delta_0 \leq 10^{-3}$. Розраховані при $\delta_0 = 0$ і $\delta_0 = 10^{-3}$ значення кривих 1 в масштабі рисунку співпадають. Збільшення товщини актуатора помітно впливає на резонансну частоту, коефіцієнт керування та обумовлену електричним навантаженням амплітуду коливань в залежності від розміру актуатора (криві 2). Збільшення розміру x_0 кільцевого актуатора супроводжується немонотонним зростанням власної частоти пластинки і нелінійною залежністю максимальної амплітуди прогинів при електричному збудженні.

Аналіз кривих залежностей коефіцієнта керування (суцільні лінії) та амплітуди прогинів при електричному збудженні (лінії з крапками) показує, що при одній і тій же величині підведеного електричного потенціалу найбільш ефективним (оптимальним) буде той актуатор, за допомогою якого викликається максимальний прогин пластинки. Розрахунки та суцільні криві 1, 2 показують, що якість ефективного актуатора характеризується величиною параметра x_0 ($0,1 \leq x_0 \leq 0,4$; $0,8 \leq x_0 \leq 1$), тобто розміром його площі, та слабкою залежністю від товщини δ . При цьому існують залежні від товщини δ розміри актуатора ($x_0 \cong 0,54$, $x_0 \cong 0,62$), при яких реалізуються найменші амплітуди прогинів w_E та максимальні значення коефіцієнта керування. Такі параметри відповідають найменш ефективному актуатору.

Вплив товщини актуатора на амплітудно-частотні характеристики (криві 1, 2) та частотні залежності усталеної ($\tau = 0,15$) температури розігріву (криві 1*, 2*), розраховані при незалежних (штрихові лінії) і залежних (суцільні лінії) від температури комплексних характеристиках пасивного та п'єзоактивного матеріалів при механічному навантаженні $P_0 = 0,8 \cdot 10^3 \text{ Па}$, показано на Рис. 2. Криві 1, 1* і 2, 2* відповідають параметрам товщини $\delta_0 = 0,001$ і $\delta_0 = 0,01$ для актуатора з відносним радіусом $x_0 = 0,26$. З аналізу частотних кривих витікає, що збільшення товщини актуатора приводить до росту резонансної частоти та зменшення прогинів і температури дисипативного розігріву. Температурна залежність властивостей матеріалу характеризується трансформацією частотних характеристик в нелінійні "м'якого" типу [6].

Для компенсації дії гармонічного навантаження $P_0 = 0,8 \cdot 10^3 \text{ Па}$ на пластинку з геометричними параметрами, що відповідають Рис. 2, розраховані з використанням (12), (13) величини активної та реактивної складових електричного потенціалу на частотах $\omega = 0,31 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ і $\omega = 0,35 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ відповідно мають такі значення: $V'_A = -27,63 \text{ В}$, $V''_A = -0,12 \text{ В}$ і $V'_A = -26,95 \text{ В}$, $V''_A = -0,18 \text{ В}$. У випадку чисто електричного збудження пластинки з цими параметрами потенціалів розрахунки для амплітудно - і температурно-частотних характеристик співпадають з кривими 1, 2, приведеними на Рис. 2 для випадку механічного навантаження з амплітудою $P_0 = 0,8 \cdot 10^3 \text{ Па}$. Числові розрахунки показали, що при сумісній протифазній дії на пластинку вищевказаних механічного та електричного збуджень амплітуди прогину зменшуються на два - три порядки, а дисипативний розігрів відсутній.

В заключення треба відмітити, що для достатньо тонких п'єзошарів актуатора ($2\delta \leq 10^{-3} h$) розрахована електрична напруженість $E = |V_A|/\delta$, що відповідає повному демпфіруванню механічних коливань, може досягати величини електричного пробою п'єзошару. Тому для гасіння механічних коливань треба або зменшувати величину прикладеного електричного потенціалу, або нарощувати товщину п'єзоактуатора.

Література

1. Карнаухов В. Г., Михайленко В. В. Нелинейные одночастотные колебания и диссипативный разогрев неупругих пьезоэлектрических тел//Прикл. механика. - 2002. - 38. - № 3. - С. - 13 - 45.

2. Карнаухов В. Г., Козлов В. І., Пятецька О. В. Активне демпфірування осесиметричних резонансних коливань круглої пластини за допомогою п'єзоелектричних включень//Вісник Київського університету. Сер. Фізико - математичні науки. - 2003. - № 2. - С. 81 - 85.
3. Карнаухов В. В., Козлов А. В., Пятецкая Е. В. Активное демпфирование осесимметричных колебаний круглой пластины при помощи распределенных сенсоров и актуаторов//Зб. " Системні технології " , Випуск: " Математичні проблеми технічної механіки ". Дніпропетровськ. - 2003. - С. 145 - 151.
4. Карнаухов В. Г. , Карнаухова Т. В., Пятецька О. В. Вплив температури дисипативного розігріву на активне демпфірування вимушених осесиметричних коливань круглої пластини за допомогою п'єзоелектричного актуатора//Вісник Київського Національного ун - ту ім. Т. Шевченка, Сер. Фіз - мат. науки. 2004. - №3. - С.107 - 114.
5. Tzou H. S. , Begman L. A. Dynamics and Control of Distributed Systems. - Cambridge: Cambridge University Press. - 1998.-400 p.
6. Карнаухов В. Г., Киричок И. Ф. Механика связанных полей в элементах конструкций. Электротермовязкоупругость. - К.: Наук. думка, 1988. - Т. 4. -320 с.
7. Карнаухов В. Г. Тепловое разрушение полимерных конструкций при моногармоническом деформировании//Прикл. механика. - 2004. - 40, № 6. - С. 1 - 46.
8. Григоренко Я. М., Мукоед А. П. Решение нелинейных задач теории оболочек на ЭВМ . - К.: Выща школа, 1983. - 278 с.
9. Нестеренко Н. П., Червинко О. П., Сенченков И. К. Моделирование ультразвукового разогрева структурных элементов полимерных волокнистых композитов при нормальном нагружении//Вестник Национального технического университета " ХПИ ". - 2002. - № 9. - с. 3 - 8.
10. Болкисев А. М., Карлаш В. Л., Шульга Н. А. О зависимости свойств пьезокерамических материалов от температуры//Прикл. механика. - 1984. - 20. - № 7. - С. 70 - 74.

Надійшла до редколегії 25 травня 2006 р.

УДК. 519.21

Оксана І. Ковтун,
Олег В. Перегуда

Oksana I. Kovtun
Oleg V. Pereguda

МОДИФІКОВАНИЙ
ПРОЕКЦІЙНО-ІТЕРАТИВНИЙ
МЕТОД РОЗВ'ЯЗАННЯ
ЛІНІЙНИХ ІНТЕГРАЛЬНИХ
РІВНЯНЬ З ДОДАТКОВИМИ
УМОВАМИ.

MODIFIED PROJECTION-
ITERATION METHOD FOR
LINEAR INTEGRAL EQUATIONS
WITHS CONDITIONS IMPOSED.

Запропоновано та обгрунтовано
модифікований проекційно-
ітеративний метод для лінійних
інтегральних рівнянь з
обмеженнями на шукану функцію.
Використовуючи узагальнену
допоміжну задачу, побудовано
розв'язок даної задачі.

*We propose and substantiate a
modified projection-iteration method
for linear integral equations with
conditions imposed on the unknown
function. The solving of the given
problem is built with the help of the
generalized additional problem.*

Ключові слова: обмеження,
модифікований проекційно-
ітеративний метод, лінійні
інтегральні рівняння, узагальнена
допоміжна задача

*Key words: limitation, modified
projection-iteration method, linear
integral equations, generalized
additional problem.*

Вступ. Розвиток науки і техніки на сучасному етапі надзвичайно розширив галузь застосування математики як засобу опису реальних явищ і процесів. Математичними моделями багатьох процесів та явищ є інтегральні диференціальні чи інтегро-диференціальні рівняння та їх системи, про розв'язки яких відома додаткова інформація. Сьогодні все більше застосування в різних галузях природознавства знаходять різні класи задач з імпульсним впливом, і узагальнені крайові задачі для диференціальних рівнянь з параметрами, і нетерові крайові задачі та інтегральні рівняння з додатковими умовами.

Побудова розв'язків задач з параметрами в явному вигляді можлива в дуже рідких окремих випадках, і навіть в цих випадках доведення

результату до числа напштовхується часом на великі труднощі. Тому побудова та обґрунтування ефективних методів наближеного розв'язку задач з обмеженнями є актуальною задачею [2]–[3].

Постановка задачі. Прикладом такої задачі може бути інтегральне рівняння

$$y(x) = f(x) + \int_{\Omega} K(x,t)y(t)dt, \quad x \in \Omega \subset R^1 \quad (1)$$

з лінійними додатковими умовами

$$\int_{\Omega} \Phi_s(t)y(t)dt = \alpha_s, \quad s = \overline{1, m}, \quad (2)$$

де ядро $K(x,t)$ і функції $f(x)$ і $\Phi_s(x)$, $(s = \overline{1, m})$ з класу $L_2(\Omega)$ – відомі, α_s , $s = \overline{1, m}$ – відома множина чисел, $y(x)$ – невідома функція.

Задачу (1), (2) будемо вважати сумісною, якщо існує функція $y(x): \Omega \rightarrow R$, яка одночасно задовольняє рівняння (1) і умову (2). В протилежному випадку задача несумісна.

Розглянемо допоміжну задачу

$$y(x) = u(x) + z(x) + \int_{\Omega} H(x,t)y(t)dt, \quad \int_{\Omega} \Phi_s(x)y(x)dx = \alpha_s, \quad s = \overline{1, m}, \quad (3)$$

де $H(x,t)$ вибираємо таким чином, щоб розв'язок задачі (3) знаходився відносно легко, $z \in L_2(\Omega)$, $H(x,t) \in L_2(\Omega \times \Omega)$, $u(x)$ – керування, яке визначається так, що функція $y(x) \in L_2(\Omega)$ – задовольняє задачі (3).

$$\text{Керування шукається у вигляді } u(x) = \sum_{i=1}^m \lambda_i \xi_i(x), \quad (4)$$

де $\{\xi_i\}_{i=1}^m \in L_2(\Omega)$ – система лінійно незалежних функцій, яка підібрана так, що задача (3) має єдиний розв'язок.

Надалі припускається, що задача (3) має єдиний розв'язок, тобто існують такі функції $G(x,t)$ і $N(x,t)$, що розв'язок цієї задачі подається формулами

$$u(x) = r(x) - \int_{\Omega} N(x,t)z(t)dt, \quad y(x) = k(x) + z(x) + \int_{\Omega} G(x,t)z(t)dt, \quad (5)$$

Відмітимо, що ядра $N(x,t)$ і $G(x,t)$ мають наступні властивості:

$$\int_{\Omega} N(x,t)\xi_k(t)dt = \xi_k(x), \quad \xi_k(x) + \int_{\Omega} G(x,t)\xi_k(t)dt = 0, \quad k = \overline{1, m}, \quad (6)$$

$$\int_{\Omega} \Phi_s(x) k(x) dx = \alpha_s, \quad s = \overline{1, m}, \quad \int_{\Omega} \Lambda_s(x) N(x, t) dx = \Lambda_s(t),$$

$$\Phi_s(t) + \int_{\Omega} \Phi_s(x) G(x, t) dx = 0.$$

Розглянемо питання сумісності поставленої задачі. Поклавши

$$z(x) = f(x) - u(x) + \int_{\Omega} B(x, t) y(t) dt, \quad B(x, t) := K(x, t) - H(x, t),$$

та позначивши

$$g(x) := f(x) - r(x) + \int_{\Omega} B(x, t) k(t) dt, \quad M(x, t) := \int_{\Omega} B(x, \eta) G(\eta, t) d\eta \quad (7)$$

з допомогою формул (5) вихідна задача (1) – (2) зводиться до інтегрального рівняння

$$z(x) = g(x) + \int_{\Omega} \{N(x, t) + B(x, t) + M(x, t)\} z(t) dt. \quad (8)$$

Інтегральне рівняння (8), врахувавши властивість (6), можна трактувати як систему рівнянь

$$\begin{cases} z(x) = g(x) + \int_{\Omega} N(x, t) z(t) dt + \int_{\Omega} (B(x, t) + M(x, t)) v(t) dt, \\ v(x) = h(x) + \int_{\Omega} L(x, t) v(t) dt, \end{cases}$$

де $v(x) = z(x) - u(x)$, $u \in U_m(\Omega)$, $v \in V_m(\Omega)$, $U_m(\Omega) \oplus V_m(\Omega) = L_2(\Omega)$,

$$h(x) := g(x) - \int_{\Omega} P(x, t) g(t) dt, \quad P(x, t) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \mathcal{G}_{ij} \xi_i(x) \xi_j(t),$$

$$L(x, t) := B(x, t) + M(x, t) - \int_{\Omega} P(x, \eta) (B(\eta, t) + M(\eta, t)) d\eta,$$

U_m – підпростір, породжений системою лінійних незалежних функцій $\{\xi_i\}_{i=1}^m$.

Враховувавши результати роботи [3], справедливі наступні теореми.

Теорема 1. Якщо $y^*(x)$ є розв'язком задачі (1) і (2), то функція

$$v^*(x) = z^*(t) - \int_{\Omega} P(x, t) z^*(t) dt,$$

де $z^*(x) = y^*(x) - \int_{\Omega} H(x, t) y^*(t) dt$, задовольняє рівняння

$$v(x) = h(x) + \int_{\Omega} L(x, t) v(t) dt \quad (9)$$

і умову

$$\int_{\Omega} N(x,t)w^*(t)dt = r(x) \tag{10}$$

де $w^*(x) = f(x) + \int_{\Omega} B(x,t)k(t)dt + \int_{\Omega} (B(x,t) + M(x,t))v^*(t)dt$.

Теорема 2. Якщо $v^*(x)$ – розв'язок рівняння (9) і виконується умова (10), то функція $y^*(x) = k(x) + v^*(x) + \int_{\Omega} G(x,t)v^*(t)dt$ задовольняє рівняння (1) та умови (2).

Теорема 3. Якщо рівняння (9) має єдиний розв'язок і виконується умова (10), то і задача (1), (2) має єдиний розв'язок.

Модифікований проекційно-ітеративний метод.

До задачі (1), (2) застосуємо модифікований проекційно – ітеративний метод. Наближені розв'язки вихідної задачі будемо визначати з допоміжної задачі

$$y_k(x) = u_k(x) + z_k(x) + \int_{\Omega} H(x,t)y_k(t)dt, \quad \int_{\Omega} \Phi_s(t)y_k(t)dt = \alpha_s, \quad s = \overline{1,m} \tag{11}$$

де $u_k(x) = \sum_{i=1}^n \lambda_i^k \xi_i(x),$ (12)

$$z_k(x) = f(x) + \int_{\Omega} B(x,t)(y_{k-1}(t) + \omega_k(t))dt. \tag{13}$$

Поправка $\omega_k(x)$ шукається у вигляді, $\omega_k(x) = \sum_{j=1}^n a_j^k \eta_j(x),$ (14)

а невідомі коефіцієнти $a_j^k, j = \overline{1,n}$ визначаються з умови

$$\int_{\Omega} (z_k(x) - z_{k-1}(x) - \beta_k(x))\psi_i(x)dx = 0, \quad i = \overline{1,n}, \tag{15}$$

де $\beta_k(x) = \sum_{j=1}^n a_j^k \varphi_j(x), \{ \eta_j(x) \}_{j=1}^n, \{ \varphi_j(x) \}_{j=1}^n, \{ \psi_j(x) \}_{j=1}^n$ – відомі системи лінійно незалежних функцій із $L_2(\Omega)$.

Початкове наближення $y_0(x)$ знаходиться з задачі (12) при $k = 0$ і заданій функції $z_0 \in L_2(\Omega)$.

Обґрунтування методу. Метод (11)–(14) можна звести до модифікованого проекційно-ітеративного методу [2] розв'язання інтегрального рівняння (8), згідно якого

$$z_k(x) = g(x) + \int_{\Omega} \{N(x,t) + B(x,t) + M(x,t)\} (z_{k-1}(t) + \beta_k(t)) dt. \quad (15)$$

$$\int_{\Omega} (z_k(x) - z_{k-1}(x) - \beta_k(x)) \psi_i(x) dx = 0, i = \overline{1, n}, \quad \beta_k(x) = \sum_{j=1}^n \alpha_j^k \varphi_j(x), \quad (16)$$

Справді, припустимо, що системи функцій $\{\eta_j(x)\}_{j=1}^n, \{\varphi_j(x)\}_{j=1}^n$ пов'язані співвідношеннями

$$\eta_j(x) = \sigma_j(x) + \varphi_j(x) + \int_{\Omega} H(x,t) \eta_j(t) dt, \quad \int_{\Omega} \Phi_i(t) \eta_j(t) dt = 0, i = \overline{1, m}, j = \overline{1, m}, \quad (17)$$

де $\sigma_j(x) = \sum_{i=1}^m \tilde{\gamma}_{ij} \xi_i(x)$.

Розв'язавши задачу (17), маємо

$$\eta_j(x) = \varphi_j(x) + \int_{\Omega} G(x,t) \varphi_j(t) dt, \quad j = \overline{1, m} \quad (18)$$

На підставі (14), врахувавши позначення (18) та (16), отримаємо

$$\omega_j(x) = \beta_j(x) + \int_{\Omega} G(x,t) \beta_j(t) dt, \quad (19)$$

В цьому випадку, розв'язок задачі (11) визначається за формулою

$$y_{k-1}(x) + \omega_k(x) = k(x) + z_{k-1}(x) + \beta_k(x) + \int_{\Omega} G(x,t) (z_{k-1}(t) + \beta_k(t)) dt, \quad (20)$$

Підставимо вираз (19) і (20) в формулу (13). В результаті отримаємо

$$z_k(x) = f(x) + \int_{\Omega} B(x,t) \left\{ k(t) + z_{k-1}(t) + \beta_k(t) + \int_{\Omega} G(t,\eta) (z_{k-1}(\eta) + \beta_k(\eta)) d\eta \right\} dt.$$

Враховуючи позначення (7), отримаємо рівність (15).

Таким чином, метод (11)–(14) розв'язання задачі (1)–(2) зводиться до модифікованого проекційно-ітеративного методу (15)–(16) розв'язання рівняння (8), достатні умови збіжності якого встановлені [2].

Достатні умови збіжності методу. Зауважимо, що після певних перетворень умову (16) зручно записати у вигляді

$$\beta_j(x) = \int_{\Omega} P(x,t) (z_j(t) - z_{k-1}(t)) dt, \quad P(x,t) = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n d_{ij} \varphi_i(x) \psi_j(t) \quad (21)$$

Очевидно, що умови (16) та (21) еквівалентні.

На основі формул (21) та (15) для визначення $\beta_k(x)$, одержимо лінійне інтегральне рівняння

$$\beta_j(x) - \int_{\Omega} M_p(x,t) \beta_j(t) dt = \int_{\Omega} P(x,t) \varepsilon_k(t) dt, \quad (22)$$

де $M_p(x,t) = \int_{\Omega} P(x,\eta) M(\eta,t) d\eta$, $\varepsilon_k(x) = g(x) - z_{k-1}(x) + \int_{\Omega} (B(x,t) + M(x,t)) z_{k-1}(t) dt$,

В подальшому припускаємо, що рівняння (22) має єдиний розв'язок, який зображається формулою

$$\beta_j(x) = \varepsilon_k(x) + \int_{\Omega} R_p(x, t) \varepsilon_k(t) dt, \quad (23)$$

де $R_p(x, t)$ – резольвента ядра $M_p(x, t)$.

Використовуючи методику роботи [1] метод (15), (22) можна звести до вигляду

$$\begin{cases} z_k(x) = g(x) + \int_{\Omega} N(x, t) g(t) dt + \int_{\Omega} A(x, t) z_{k-1}(t) dt \\ v_k(x) = h(x) + \int_{\Omega} L(x, t) v_{k-1}(t) dt \end{cases},$$

де $N(x, t) = B(x, t) + M(x, t) + \int_{\Omega} (B(x, \eta) + M(x, \eta)) R_p(\eta, t) d\eta$,

$$\begin{aligned} A(x, t) = & B(x, t) + M(x, t) - (B(x, t) + M(x, t)) \int_{\Omega} R_p(t, \eta) d\eta + \\ & + (B(x, t) + M(x, t)) \iint_{\Omega} R_p(t, \eta) (B(\eta, \xi) + M(\eta, \xi)) d\xi d\eta \end{aligned}$$

Сформулюємо достатні умови збіжності методу.

Введемо позначення

$$\tilde{A} = \begin{pmatrix} r & p \\ t & b \end{pmatrix},$$

$$r = 1 + \alpha, p = \|A\|, t = 1 + \alpha, \|L\| = b. \quad (24)$$

Константи α, β, γ – визначаються з наступних нерівностей

$$\left\{ \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} L(x, t) y(t) dt \right|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \leq b \|y\|, \quad \left\{ \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} G(x, t) y(t) dt \right|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \leq \alpha \|y\|, \quad (25)$$

$$\left\{ \int_{\Omega} \left| \int_{\Omega} A(x, t) y(t) dt \right|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \leq p \|y\|. \quad (26)$$

Теорема 4. Якщо спектральний радіус матриці $\rho(\tilde{A}) < 1$, і задача (1)–(2) сумісна, то вона має єдиний розв'язок $y^* \in L_2(\Omega)$, і послідовність $\{y_k(x)\}_{k=1}^{\infty}$, побудована за методом (11)–(15) збігається по нормі в $L_2(\Omega)$ до цього розв'язку.

Оцінки похибки методу. Введемо позначення $(Uz)(x) := \int_{\Omega} A(x, t) z(t) dt$

Теорема 5. Якщо для будь яких $u, v \in L_2(\Omega)$ виконується нерівність

$\|Uv - Uu\| \leq \bar{q}\|v - u\|$, $\bar{q} < 1$, і задача (1) - (2)-сумісна, то справедливі наступні оцінки

$$\|y^* - y_k\| \leq (1 + \alpha)\bar{q}^k \|z^* - z_0\|, \|y^* - y_k\| \leq \frac{(1 + \alpha)\bar{q}^{\bar{k}-s}}{1 - \bar{q}} \|z_{s+1} - z_s\|, \quad (s = 0, \bar{k} - 1)$$

де $z_k(x)$ будується за формулою (13), $z^*(x) = g(x) + \int_{\Omega} (B(x, t) + M(x, t))v^*(t)dt$, а α визначається з нерівності (25).

З а у в а ж е н н я: Якщо $p + r \leq 1$, то U є оператор стиску, де константи p та r визначаються з формули (24)–(26).

Висновки. В даній роботі знайдено умови сумісності лінійних інтегральних рівнянь з обмеженнями. Побудовано та обґрунтовано модифіковано проекційно-ітеративний метод. Встановлено достатні умови збіжності та оцінки похибки запропонованого методу. Такий підхід значно покращує спектральний радіус отриманого оператора рівносильного інтегрального рівняння. Тоді, якщо до вихідної задачі наближені методи не могли бути застосовані або збігалися повільно, то новий метод побудовано з використанням узагальненої допоміжної задачі, мають більш широку область застосування і набагато швидше збігаються.

Література.

1. Лучка А.Ю. Интегральные уравнения с ограничениями и методы их решения//Кибернетика и системный анализ.- Киев. НАН Украины, Ин-т кибернетики, 1996,-№3-С.82-96.
2. Лучка А.Ю. Проекционно-итеративные методы. –Киев:Наук. думка.1993. –288с..
3. Ковтун О.І. Інтегральні рівняння Фредгольма другого роду з додатковими умовами // Вісн. Київ. ун-ту. Серія фіз.-мат. науки.– 1997.–Вип.1.–С.81–89.

Надійшла до редакції 15.05.2006.

УДК 532.5

Антоніна О. Губа,
Олександр А. Гуржій,
В'ячеслав В. Мелешко

**Рівномірно-обертові конфігурації
точкових вихрів**

За допомогою чисельного метода Ньютона розв'язано нелінійну систему рівнянь руху точкових вихрів в необмеженій рідині та знайдено нові несиметричні конфігурації розташування рівномірно-обертових систем вихрів на площині.

Ключові слова: точкові вихрі
рівномірно-обертові несиметричні
конфігурації.

E-mail guba@univ.kiev.ua
gourjii@i.com.ua
meleshko@univ.kiev.ua

Antonina O. Guba
Aleksandr A. Gourjii,
Vyacheslav V. Meleshko

**Uniformly-rotating configurations of
point vortices**

By means of the Newton method the nonlinear system of equations for point vortices motion on an unbounded plane in an inviscid fluid is solved/ New asymmetrical configurations of the uniformly-rotating systems of vortices on the plane is discovered.

Keywords: point vortices, uniformly
rotating asymmetric configurations.

Задача про пошук рівномірно-обертових конфігурацій точкових вихрів однакової інтенсивності на необмеженій двовимірній площині в ідеальній рідині відома ще з робіт В. Томсона (лорда Кельвіна) другої половини 19 століття [1]. Пізніше Дж. Дж. Томсон та Т. Хавелок детально вивчили симетричні конфігурації, коли вихрі знаходяться в вершинах правильного N -кутника. Найбільш повним зібранням чисельно отриманих стійких конфігурацій, при яких вихрі розташовані на вкладених одне в одне концентричних колах („атомних оболонках”, за термінологією Кельвіна), являється, так званий, Лос-Аламоський каталог [4]. Ці конфігурації обов'язково мають або центральну, або дзеркальну симетрію.

Недавно виявилось [2,3,5], що існує новий клас рівномірно-обертових систем точкових вихрів – несиметричні конфігурації. В даній роботі представлені нові, відмінні від [2,3,5], несиметричні конфігурації.

Задача про пошук конфігурацій N точкових вихрів однакової інтенсивності Γ , які на комплексній площині знаходяться в точках $z_\alpha(t), \alpha = 1 \dots N$, зводиться до інтегрування нелінійної системи диференціальних рівнянь

$$\frac{dz_\alpha^*}{dt} = \frac{\Gamma}{2\pi i} \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{z_\alpha - z_\beta}, \quad (1)$$

де $*$ позначено комплексно спряжену величину, а штрих при сумі означає, що $\alpha \neq \beta$.

Якщо система N вихрів рівномірно обертається з постійною кутовою швидкістю ω , то розв'язок системи (1) доцільно шукати у вигляді

$$z_\alpha = Z_\alpha e^{i\omega t}, \alpha = 1 \dots N, \quad (2)$$

де Z_α - деякі, поки що невідомі, сталі.

Підставивши (2) в (1), отримаємо

$$Z_\alpha^* = \frac{\Gamma}{2\pi i \omega} \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{Z_\alpha - Z_\beta}.$$

Для спрощення вибираємо масштаб одиниць так, щоб $\frac{\Gamma}{2\pi i \omega} = 1$, тоді остаточно рівняння руху приймають вигляд

$$Z_\alpha^* = \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{Z_\alpha - Z_\beta}, \alpha = 1 \dots N. \quad (3)$$

Рівняння (3) представляє алгебраїчну систему N рівнянь з комплексними невідомими. Загальна теорія їх розв'язку на сьогодні відсутня. В роботі [3] запропонований ефективний метод для знаходження деяких розв'язків.

До розгляду вводиться функція току рідини, зумовлена такою конфігурацією точкових вихрів

$$\psi(z) = - \sum_{\alpha=1}^N \ln[(z - z_\alpha)(z - z_\alpha)^*] + zz^*. \quad (4)$$

Доданок zz^* з'являється внаслідок того, що наша система обертається..

Якщо знайти нерухомі точки z_0 в рідині, тобто точки, де $\psi(z)$ має екстремум, то розмістивши в цих точках вихор нульової інтенсивності, ми не змінюємо умови течії.

Для переходу з конфігурації N вихрів до $N+1$ застосовуємо наступну схему:

1) беремо будь-яку, нехай симетричну, конфігурацію рівномірно обертових точкових вихрів;

2) будуємо для неї лінії току (деякі лінії току рівномірно-обертових конфігурацій 6, 7, 8 та 9 точкових вихрів представлені на рис.1), знаходимо на площині точки, в яких швидкість дорівнює 0;

3) в нерухомих точках площини течії розміщаємо вихор інтенсивності 0 та поступово з певним кроком збільшуємо інтенсивність цього вихору до 1.

На кожному кроці рівняння системи набуває вигляду

$$\begin{aligned} Z_{\alpha}^* &= \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{Z_{\alpha} - Z_{\beta}} + \frac{\varepsilon}{Z_{\alpha} - Z_{N+1}}, \\ Z_{N+1}^* &= \sum_{\beta=1}^N \frac{1}{Z_{N+1} - Z_{\beta}}, \end{aligned} \quad (5)$$

де $0 < \varepsilon < 1$. Ця система визначає рівновагу з $N+1$ вихром (N вихрів інтенсивності 1 та вихром інтенсивності ε , що обертається з однаковою кутовою швидкістю).

Для розв'язання нелінійної системи рівнянь (5) ми використали метод Ньютона.

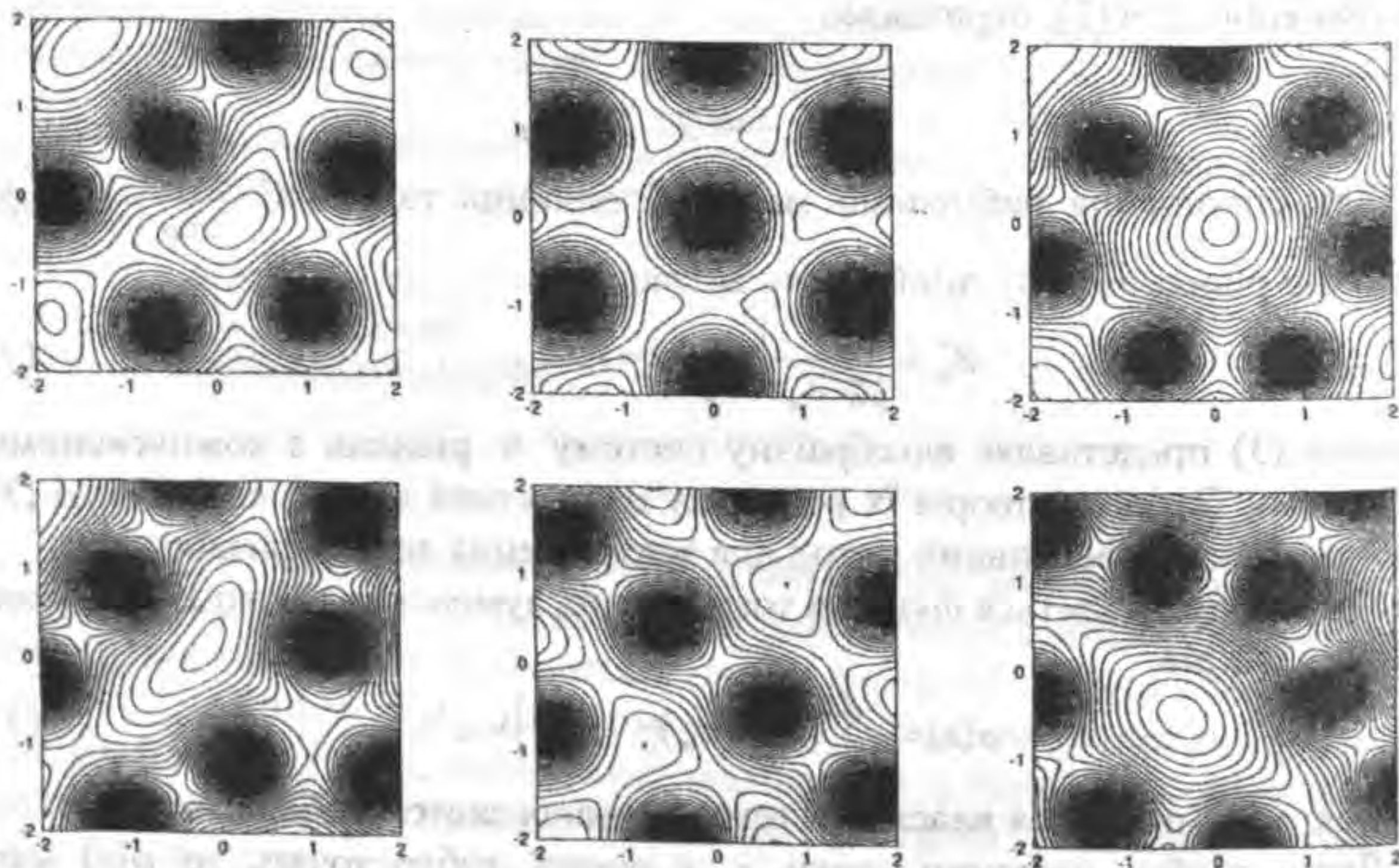
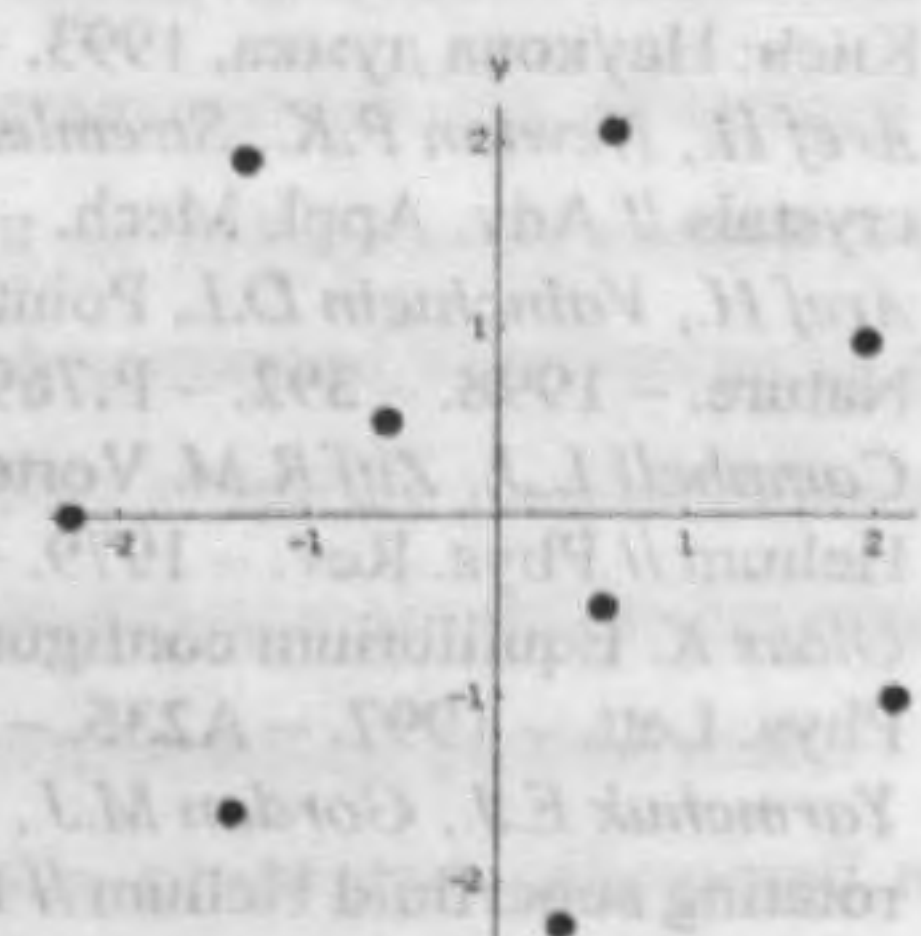
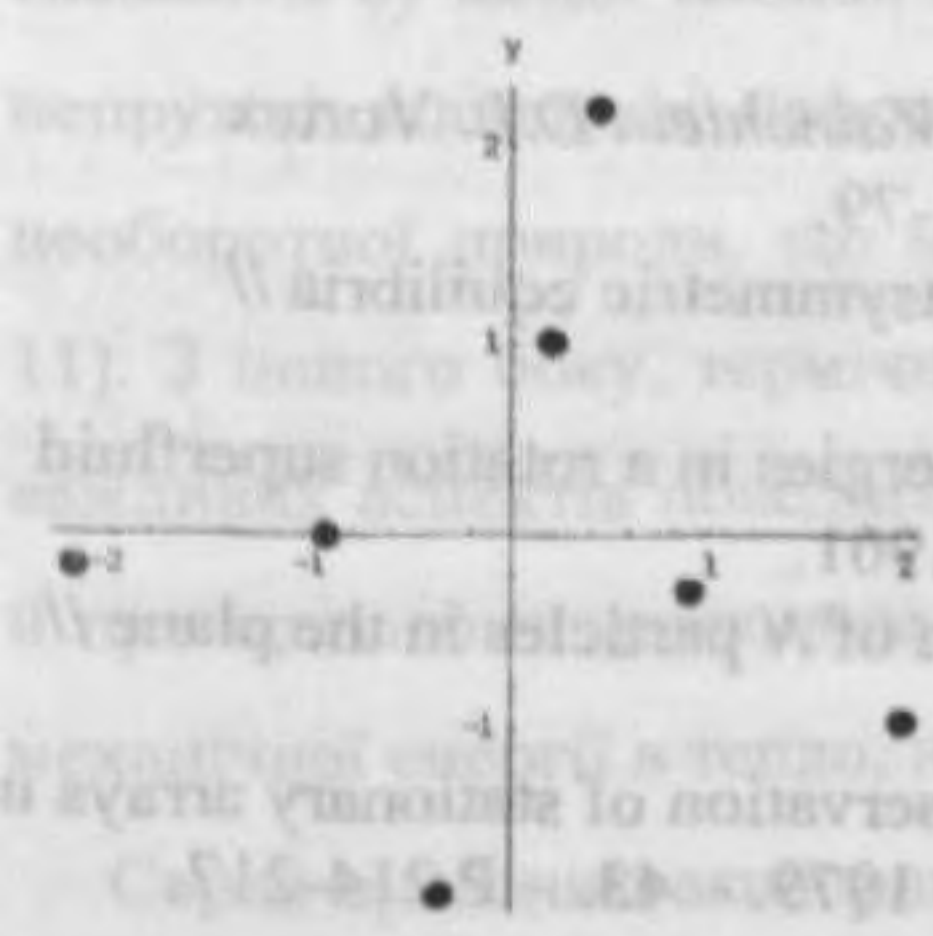
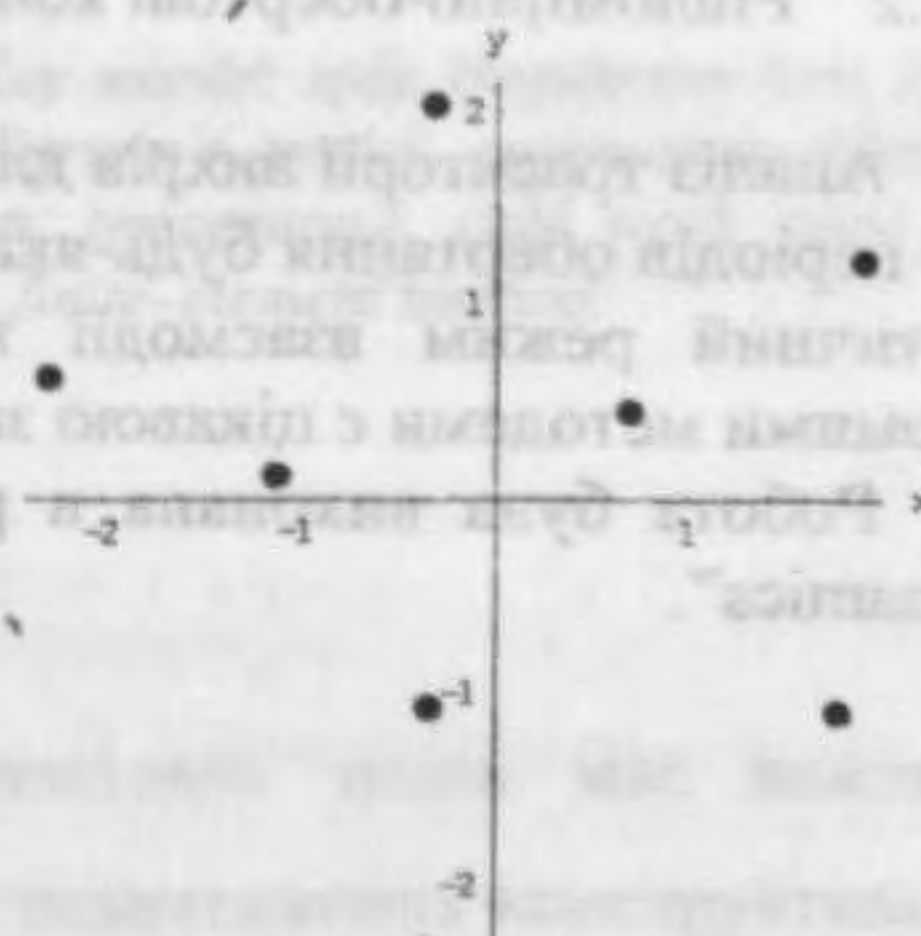
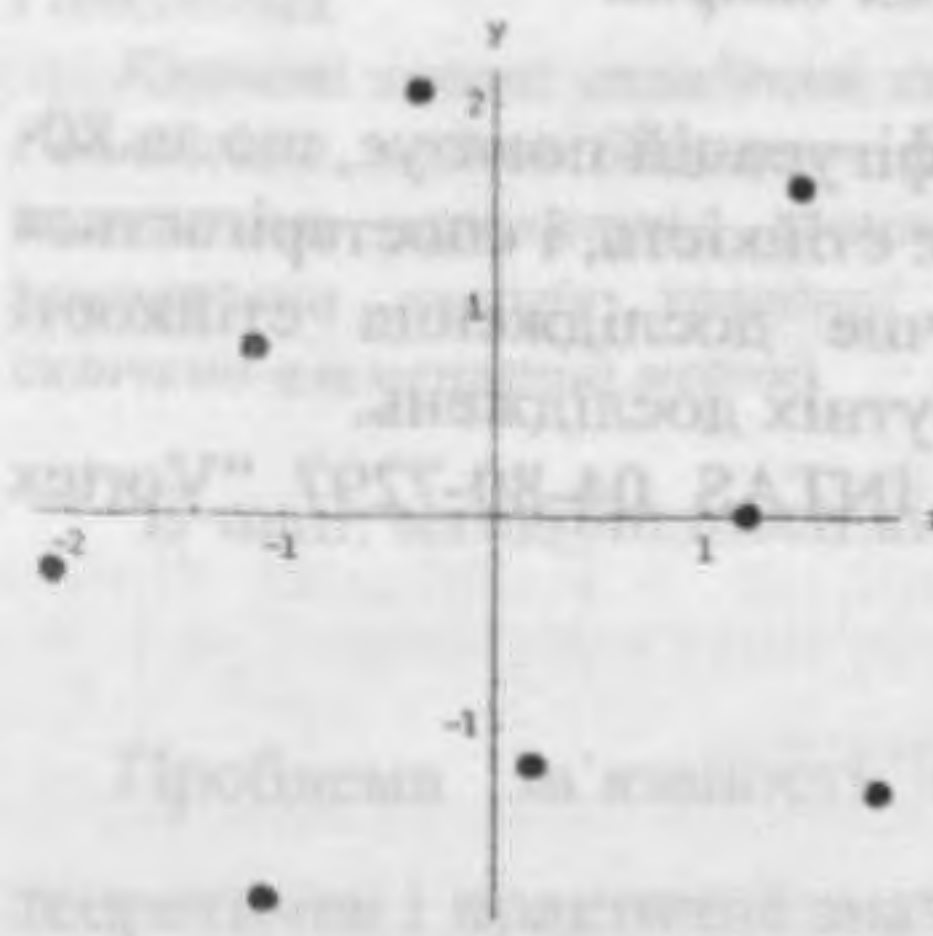
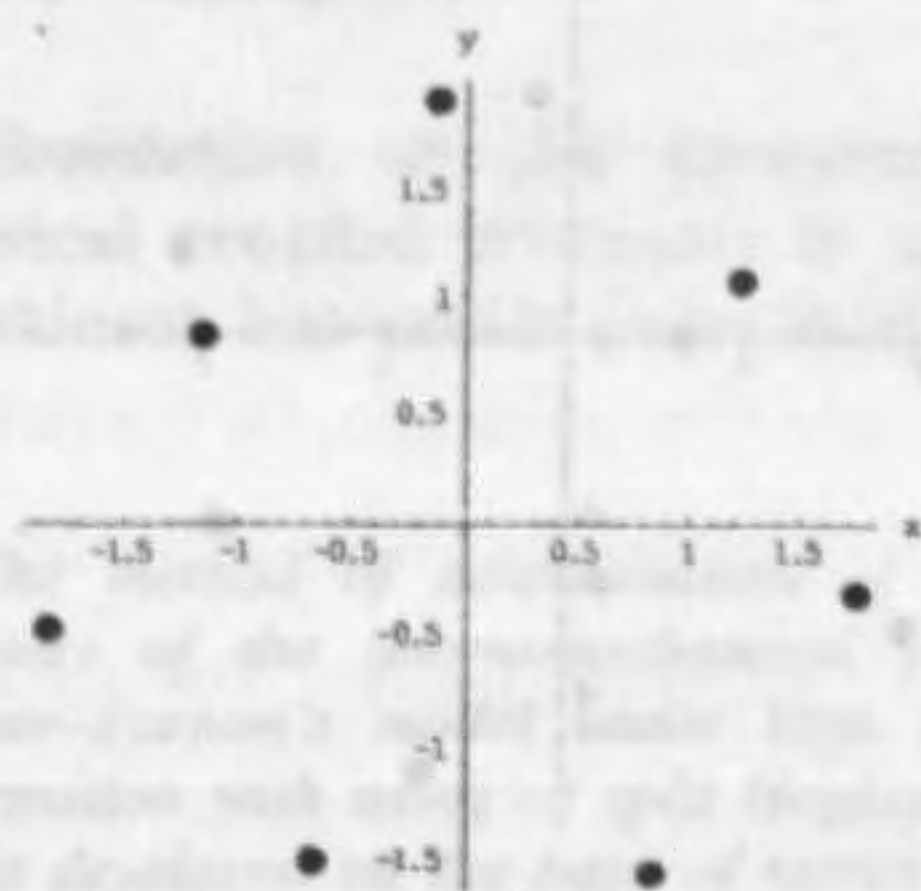
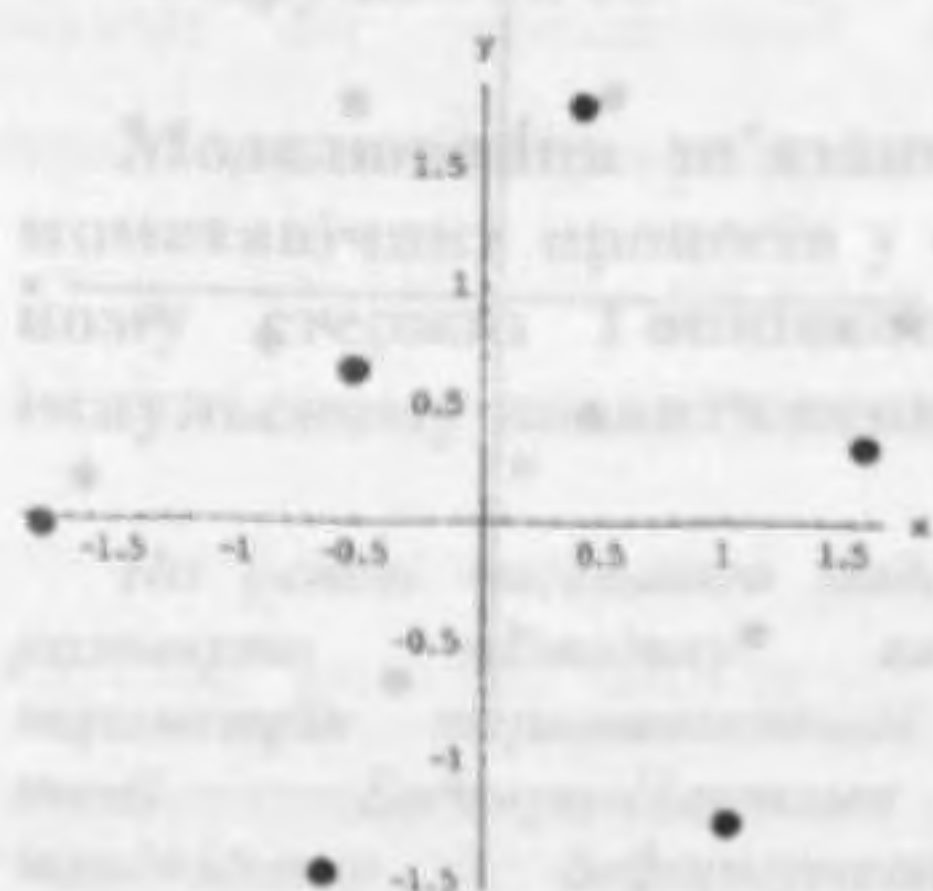


Рис.1 Лінії тока рівномірно-обертових конфігурації з 6, 7, 8 та 9 точкових вихрів

На рис.2 вказано можливі конфігурації систем точкових вихрів для 6, 7, 8, 9 та 10 точкових вихрів. Ці конфігурації не були наведені в роботах [2,3,5].



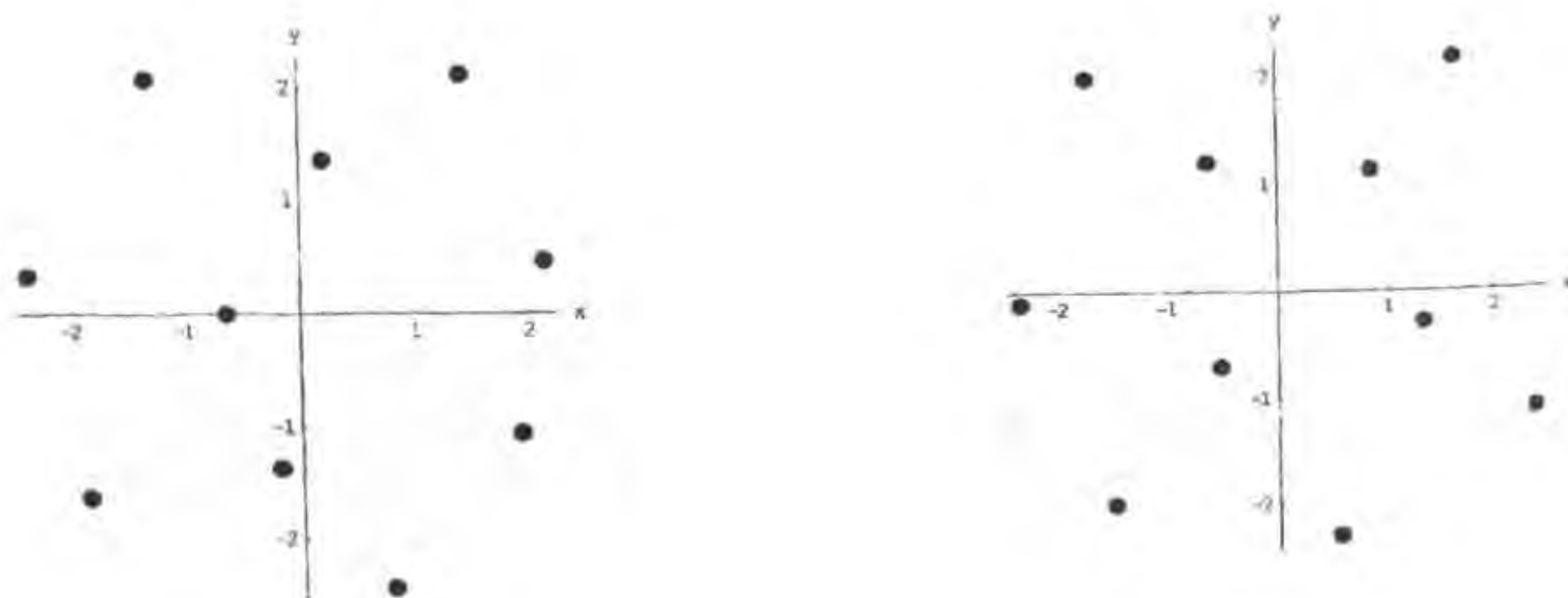


Рис.2 Рівномірно-обертові конфігурації точкових вихрів.

Аналіз траєкторії вихрів для цих нових конфігурацій показує, що за 80-100 періодів обертання будь-яка система втрачає стійкість, і спостерігається хаотичний режим взаємодії вихрів. Аналітичне дослідження стійкості відомими методами є цікавою задачею для майбутніх досліджень.

Робота була виконана в рамках проекту INTAS 04-80-7297 "Vortex Dynamics".

Література

1. Мелешко В.В., Константинов М.Ю. Динамика вихревых структур. – Киев: Наукова думка, 1993. – 283 с.
2. Aref H., Newton P.K., Stremler M., Tokieda T., Vainchtein D.L. Vortex crystals // Adv. Appl. Mech. – 2003. – 29. – P.1-79.
3. Aref H., Vainchtein D.L. Point vortices exhibit asymmetric equilibria // Nature. – 1998. – 392. – P.769-770.
4. Campbell L.J., Ziff R.M. Vortex patterns and energies in a rotation superfluid Helium // Phys. Rev. – 1979. – B20. – P.1886-1901.
5. Glass K. Equilibrium configuration for a system of N particles in the plane // Phys. Lett. – 1997. – A235. – P.591-596.
6. Yarmchuk E.J., Gordon M.J., Packard R.E. Observation of stationary arrays in rotating superfluid Helium // Phys. Rev. Lett. – 1979. – 43. – P.214-217.

Надійшла до редколегії 20.06.2006 р.

УДК 539.3

Сенченков І.К.
Андрушко Н.Ф.

I.K. Senchenkov
N.F. Andrushko

Моделювання зв'язаних термомеханічних процесів у складеному стержні Гопкінсона при імпульсному навантаженні

Simulation of the thermomechanical coupled processes in split Hopkinson bar under pulse loading

На основі чисельного моделювання розвинуто методiku визначення параметрів термомеханічної моделі течії Боднера–Партома при швидкісному деформуванні за використання складеного стержня Гопкінсона.

The method of determination of parameters of the thermomechanical yield Bodner–Partom's model under high rate deformation with using of split Hopkinson bar is developed on the base of numerical simulation.

Ключові слова: складений стержень Гопкінсона, модель Боднера – Партома, визначення параметрів, температура, накопичена енергія холодної роботи, скінчено-елементний метод.

Key words: split Hopkinson bar, Bodner–Partom's model, parameters determination, temperature, cold work store energy, finite-element method.

*E-mail: term@in.mech.kiev.ua

Проблема зв'язаності механічних і теплових полів має важливе теоретичне і практичне значення. Імпульсні навантаження конструктивних елементів сучасної техніки в процесі експлуатації, як правило, викликають непружні залишкові деформації та зміну температури тіл оборотної та необоротної природи, що можуть призвести до руйнування елемента [9–11]. З іншого боку, термічні ефекти при деформуванні відображають ряд важливих аспектів поведінки матеріалів, аналіз котрих є ускладненим або й принципово неможливим в рамках суто механічних моделей: дисипація механічної енергії в тепло, накопичення енергії холодної роботи тощо.

Серед сучасних експериментальних засобів отримання інформації про динамічні властивості матеріалу випробування із використанням складеного стержня Гопкінсона є найбільш поширеними та

обґрунтованими [7]. Завдяки розробці апаратури для вимірювання температури в зразку при проходженні хвилі [8] відкрилась можливість досліджувати також ефекти термомеханічної зв'язаності в матеріалі.

В даній роботі на основі чисельного моделювання розширюються можливості метода складеного стержня Гопкінсона: на прикладі термодинамічно узгодженої моделі Боднера-Партома дається обґрунтування можливості визначення параметрів, що відповідають за ефект Баушінгера, та пропонується методика розрахунку термомеханічних параметрів за зміною температури зразка.

Термодинаміка. Вводиться прямокутна декартова система координат $(ox_1x_2x_3)$. Поточний стан матеріального елемента характеризується спостережними змінними стану: температурою θ , пружною деформацією ε_{ij}^e і набором внутрішніх змінних q_k . Пружна деформація визначається наступним чином:

$$\varepsilon_{ij}^e = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^p - \alpha(\theta - \theta_0); \quad i, j = 1, 2, 3, \quad (1)$$

де ε_{ij} і ε_{ij}^p – повна і непружна деформації, α – коефіцієнт лінійного теплового розширення, θ_0 – відлікова температура.

В якості термодинамічного потенціалу обирається вільна енергія Гельмгольца у вигляді [4]

$$\psi = C_v [\theta - \theta_0 - \theta \ln(\theta / \theta_0)] + \frac{1}{2} K_v \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ij}^e + G e_{ij}^e e_{ij}^e + \psi^p(\delta, \alpha_{ij}), \quad (2)$$

де C_v – об'ємна теплоємність при постійному тиску; G і K_v – модулі зсуву і об'ємного стиску; ψ^p – непружна частина вільної енергії; δ і α_{ij} – внутрішні змінні, які відповідають за ізотропне і направлене зміцнення.

Надалі припускається малість термічних збурень, т.б. $|\theta - \theta_0| / \theta_0 \ll 1$.

Орієнтуючись на модель Боднера – Партома, вираз для ψ^p і рівняння еволюції для внутрішніх змінних δ і α_{ij} приймаються у вигляді

$$\psi^p = m_1 K_1^2 \delta^2 / (2c) + m_2 D_1^2 \alpha_{ij}^2 / (2d); \quad (3)$$

$$\dot{\delta} = \frac{c}{K_1} \left(1 - \frac{K}{K_1} \right) \dot{W}^p; \quad \delta(0) = \delta_0; \quad \dot{\alpha}_{ij} = \frac{d}{D_1} \left(U_{ij} - \frac{\beta_{ij}}{D_1} \right) \dot{W}^p; \quad \alpha_{ij}(0) = \alpha_{0ij}. \quad (4)$$

Тут K_1 , D_1 , m_1 , m_2 , c і d – параметри моделі; β_{ij} і K – функції зміцнення, спряжені до δ і α_{ij} ; $U_{ij} = \sigma_{ij} / (\sigma_{mn} \sigma_{mn})^{1/2}$; $\dot{W}^p = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^p$.

Стандартна термодинамічна процедура [4] приводить до визначальних рівнянь для напружень σ_{ij} , ентропії η та термодинамічних сил K і β_{ij} :

$$s_{ij} = 2G e_{ij}^e; \quad \sigma_{kk} = 3K_v \varepsilon_{kk}^e; \quad \eta = C_v \ln(\theta / \theta_0) + 3\alpha K_v \varepsilon_{kk}^e; \quad (5)$$

$$K = m_1 K_1^2 \delta / c; \quad \beta_{ij} = m_2 D_1^2 \alpha_{ij},$$

а також рівняння для швидкості дисипації

$$D' = \sigma_{ij} \dot{\varepsilon}_{ij}^p - K \dot{\delta} - \beta_{ij} \dot{\alpha}_{ij}, \quad (6)$$

де s_{ij} і e_{ij} – девіатори тензорів напружень та деформацій.

Приймаючи для теплового потоку закон Фур'є, після перетворень отримуємо рівняння теплопровідності

$$C_v \dot{\theta} = (k \theta_{,i})_{,i} - 3\alpha \theta K_v (\dot{\varepsilon}_{kk} - 3\alpha \dot{\theta}) + D'. \quad (7)$$

Тут k – коефіцієнт теплопровідності, $\theta_{,i} = \partial \theta / \partial x_i$.

Постановка динамічної зв'язаної задачі в циліндричній системі координат $orz\varphi$ містить:

кінематичні рівняння Коші для деформацій

$$\varepsilon_{zz} = u_{z,z}; \quad \varepsilon_{rr} = u_{r,r}; \quad \varepsilon_{\varphi\varphi} = u_r / r; \quad \varepsilon_{rz} = \frac{1}{2} (u_{z,r} + u_{r,z}); \quad (8)$$

рівняння руху

$$\sigma_{rr,r} + \sigma_{rz,z} + (\sigma_{rr} - \sigma_{\varphi\varphi}) / r = \rho \ddot{u}_r; \quad \sigma_{zz,z} + \sigma_{rz,r} + \sigma_{rz} / r = \rho \ddot{u}_z; \quad (9)$$

рівняння балансу енергії (7); рівняння узагальненої моделі течії Боднера–Партома [4], а саме:

закон течії і рівняння непружної нестискуваності

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \lambda s_{ij}; \quad \dot{\varepsilon}_{kk}^p = 0, \quad i, j = r, z, \theta; \quad (10)$$

кінетичне рівняння

$$D_2^p = D_0^2 \exp\left[-(Z^2/3J_2)^n\right], \quad (11)$$

де $J_2 = \frac{1}{2} s_{ij} s_{ij}$; $D_2^p = \frac{1}{2} \dot{\varepsilon}_{ij}^p \dot{\varepsilon}_{ij}^p$; $J_2 = \lambda^{-2} D_2^p$; $\lambda^2 = D_2^p J_2^{-1}$; $Z = K + D$;

отримані із (4) та (5) еволюційні рівняння для K і β_{ij}

$$\dot{K} = m_1 (K_1 - K) \dot{W}_p; \quad \dot{\beta}_{ij} = m_2 (D_1 U_{ij} - \beta_{ij}) \dot{W}_p; \quad K(0) = K_0; \quad \beta_{ij}(0) = 0, \quad (12)$$

закон Гука (5); початкові умови:

$$u_i = 0; \quad \dot{u}_i = 0; \quad \theta = \theta_0 \quad \text{при } t = 0. \quad (13)$$

До набору співвідношень (1)–(13) слід додати граничні умови.

Механічна теорія стержня Гопкінсона. Стержень Гопкінсона складається із двох стержнів тиску довжини l_1 і l_2 радіусу r_1 та зразка-таблетки між ними з параметрами відповідно l_s і r_s (рис.1). Його вісь співпадає із віссю oz . Складений стержень збуджується імпульсним навантаженням на торці правого стержня.

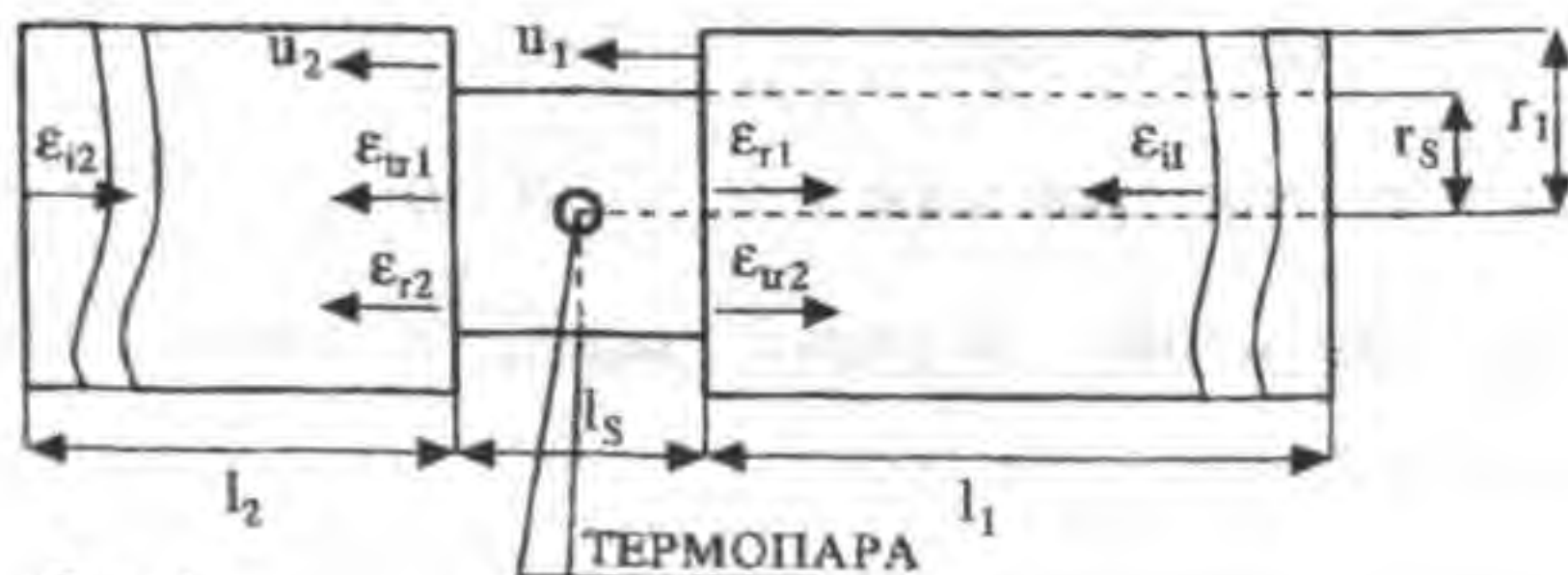


Рис.1

В моделі, запропонованій Гопкінсоном, розглядається поширення хвиль в стержні на базі одновимірної теорії пружності [7]. Середні деформація та напруження в зразку шукаються за виразами [1]:

$$\varepsilon_s = -\frac{2c}{l_s} \int_0^t \varepsilon_{r1} dt', \quad \sigma_s = E(A/A_s) \varepsilon_{r1}. \quad (14)$$

Тут A_s – площа поперечного перерізу зразка, інші позначення надані на рис.1, величини ε_{r1} та ε_{r1} вимірюються тензодатчиками в стержнях тиску.

Термомеханічна теорія стержня Гопкінсона. Простота практичного використання стержня Гопкінсона стимулювала дослідження можливості отримання більшого об'єму інформації при проведенні експеримента. Наприклад, вважаючи термічну деформацію нехтовно малою, можна визначити непружну деформацію зразка:

$$\varepsilon_s^p = \varepsilon_s - \varepsilon_s^e = \varepsilon_s - \sigma_s / E_s, \quad (15)$$

де E_s – модуль пружності зразка.

Використовуючи стержень Гопкінсона, можна дослідити ефект Баушінгера. Щоб отримати в зразку стиск із наступним розтягом, необхідно відстежити проходження заданого імпульса із одного в інший та навпаки (рис.1). При відбитті від лівого вільного торця хвиля стиску змінює знак і створює в зразку реверсне навантажування із виходом у непружну область. Позначивши цю хвилю (та відповідні відбиту і заломлену) індексом 2, отримаємо вирази для знаходження середніх деформації та напружень у зразку:

$$\varepsilon_s = -\frac{2c}{l_s} \int_0^{t_1} \varepsilon_{r1} dt' - \frac{2c}{l_s} \int_{t_1}^t \varepsilon_{r2} dt'; \quad (16)$$

$$\sigma_s = E(A/A_s) \varepsilon_{r1} + E(A/A_s) \varepsilon_{r2}, \quad (17)$$

Величини з індексом 1 відповідають першій серії хвиль і визначені в інтервалі $0 < t \leq t_1$, за який хвиля стиску досягає вільного торця стержня.

Отримані дані можна застосувати для конкретизації механічних і термомеханічних параметрів термодинамічно розширеної моделі Боднера–Партома. Для прикладу знайдемо значення параметрів c і d , які

визначають частку розсіяної енергії, що переходить в тепло механізмами ізотропного і направленого зміцнення.

Продиференціюємо за часом кульову складову тензора напружень σ_{kk}

$$\dot{\sigma}_{kk} = 3K_v(\dot{\epsilon}_{kk} - 3\alpha\dot{\theta}). \quad (18)$$

Слід відмітити, що в стержньовій теорії $\sigma_{kk} = \sigma_{zz}$.

Проінтегруємо рівняння теплопровідності (7), використовуючи вираз (18) і враховуючи, що термічні збурення покладаються малими, при умовах $\sigma_{kk}(0) = 0$, $D'(0) = 0$. Отримуємо

$$C_v \Delta\theta = -\alpha\theta_0 \sigma_{kk} + D \quad \text{або} \quad \Delta\theta = \Delta\theta_{the} + \Delta\theta_{dis}. \quad (19)$$

$$\text{Тут } D = \int_0^t D'(\tau) d\tau; \quad \Delta\theta_{the} = -\alpha\theta_0 \sigma_{kk} / C_v \quad \text{і} \quad \Delta\theta_{dis} = D / C_v - \text{відповідно}$$

термопружна та дисипативна складові приросту температури.

Будемо вважати D функцією шуканих параметрів c і d . Враховуючи (6), запишемо вираз для дисипації

$$D = W^p - (c\phi_K + d\phi_\beta), \quad (20)$$

$$\text{де } \phi_K = K_1^{-1} \int_0^t K(1 - K/K_1) \dot{W}^p d\tau; \quad \phi_\beta = D_1^{-1} \int_0^t \beta_{ij}(U_{ij} - \beta_{ij}/D_1) \dot{W}^p d\tau.$$

З (19), (20) отримаємо вираз для визначення невідомих параметрів

$$W^p - c\phi_K - d\phi_\beta = (\Delta\theta - \Delta\theta_{the})C_v. \quad (21)$$

Зміна температури в зразку $\Delta\theta(t)$ вимірюється термопарою; $\Delta\theta_{the}(t)$, $W^p(t)$, $\phi_K(t)$, $\phi_\beta(t)$ – обчислюються за використання знайдених механічних параметрів моделі та експериментальних вимірів. Значення c і d вибираються з умови мінімального відхилення R від умов рівності (21)

$$R = \min_{i,j} \sum_{i=1}^I \sum_{j=1}^J \int_{\tau_1}^{\tau_2} ((\Delta\theta - \Delta\theta_{the})C_v - (W^p - c_i\phi_K - d_j\phi_\beta))^2 d\tau, \quad (22)$$

де τ_1, τ_2 визначають інтервал часу, протягом якого вимірюється температура в зразку; $(c_i), (d_j)$ – набори значень параметрів.

Результати чисельного аналізу. Задача розв'язується МСЕ, використовується підхід, викладений в роботах [3, 4].

Матеріал стержнів тиску – сталь марки 1Х18Н9Т, зразка – алюмінієвий сплав АМг–6 із пружними та теплофізичними характеристиками:

для АМг-6 – $E = 0,816 \cdot 10^5 \text{ МПа}$; $\nu = 0,34$; $C_v = 2,341 \text{ МПа/}^\circ\text{K}$;
 $\alpha = 0,25 \cdot 10^{-4} \text{ }^\circ\text{K}^{-1}$; $k = 117 \text{ Вт/(м} \cdot ^\circ\text{K)}$; для сталі – $E = 2,05 \cdot 10^5 \text{ МПа}$,
 $\nu = 0,28$, $C_v = 3,878 \text{ МДж/(м}^3 \cdot ^\circ\text{K)}$; $\alpha = 0,16 \cdot 10^{-4} \text{ }^\circ\text{K}^{-1}$; $k = 22 \text{ Вт/(м} \cdot ^\circ\text{K)}$.

В результаті обробки експериментальних діаграм навантаження [2] і результатів випробувань [5, 6] отримані наступні значення параметрів моделі Боднера–Партома для сплаву АМг–6:

$$n = 4,0; m_1 = 0,082 \text{ МПа}^{-1}; m_2 = 0,8 \text{ МПа}^{-1}; D_0 = 10^8 \text{ с}^{-1}; K_0 = 305 \text{ МПа};$$
$$K_1 = 535 \text{ МПа}; D_1 = 72 \text{ МПа}; d = 1,50; c = 1,55.$$

Цей набір параметрів забезпечує добру апроксимацію масиву експериментальних даних в області швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 10^{-4} \text{ с}^{-1} \div 2 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$, а також враховує ефект Баушінгера.

Граничні механічні та теплові умови:

$$\sigma_z = f(t), \sigma_r = 0, \theta_z = 0, \text{ при } 0 < r \leq r_1, z = l_1 + l_2 + l_s;$$
$$\sigma_z = 0, \sigma_r = 0, \theta_z = 0, \text{ при } 0 < r \leq r_1, z = 0;$$
$$\sigma_{rr} = 0, \sigma_{rz} = 0, \theta_r = 0, \text{ при } r = r_1, 0 \leq z \leq l_2, l_2 + l_s \leq z \leq l_1 + l_2 + l_s;$$
$$\sigma_{rr} = 0, \sigma_{rz} = 0, \theta_r = 0, \text{ при } r = r_s, l_2 < z < l_2 + l_s.$$

Форма імпульсів вибирається у вигляді половини синусоїди

$$\sigma = \begin{cases} 0, & t > t_{im}; \\ \sigma_0 \sin(\pi/t_{im}), & 0 < t < t_{im}, \end{cases}$$

де t_{im} – тривалість, σ_0 – амплітуда імпульсу навантаження.

Вихідні дані: $l_1 = 1,22 \text{ м}$; $l_2 = 0,6 \text{ м}$; $l_s = 0,006 \text{ м}$; $r_1 = 0,008 \text{ м}$; $r_s = 0,006 \text{ м}$;
значення σ_0 від -100 МПа до -420 МПа ; $t_{\text{от}} = 40 \cdot 10^{-6} \text{ с}$; $\theta_0 = 293^\circ \text{ К}$.

Гладкий контакт стержнів та зразка моделюється введенням прошарків трансверсально ізотропного пружного матеріалу [1].

Якість апроксимації діаграм $\sigma - \epsilon$ при одновісному розтягу ілюструється на рис.2. Задовільна відповідність розрахованих за МСЕ (суцільна крива), експериментальних для швидкості деформації $\dot{\epsilon} = 2 \cdot 10^3 \text{ с}^{-1}$ (кружки) та наближених за Гопкінсоном (квадрати) даних говорить про достатню точність застосованого методу і правильний вибір геометричних параметрів. Маючи співвідношення $\sigma - \epsilon$, визначене за використання хвилі стиску, можемо конкретизувати величини механічних параметрів моделі Боднера-Партома K_0 та m_1 .

Наближені значення непружної деформації в зразку ϵ_s^p (крива 1 рис.3), розраховані за (15), дещо нижчі точних (2), однак рівні залишкових непружних деформацій співпадають. Тут t^* – час, відлік котрого починається з моменту приходу відповідних хвиль в точки виміру деформацій.

Крива «стиск-розтяг» зразка наведена на рис.4. Тут σ^- – напруження стиску в непружній області, з якого починається розвантаження із реверсом в область напружень розтягу, а σ_{02}^+ умовна границя текучості за допуском $\epsilon^p = 0,2\%$ при розтягу. Точність оцінки ефекта Баушінгера ілюструється на рис.5. Позначення ті ж, що і для рис.2; $s^* = \sigma_{02}^+ / \sigma^-$. Значення s^* , отримані наближеним методом, близькі до прогнозованого рівня 0,8. Швидкість насичення s^* відповідає розрахунковій. Це забезпечує можливість достатньо точного визначення m_2 , D_1 , K_1 .

Перейдемо
до визначення
термомеханічних
параметрів c і
 d . Для цього
розглянемо
термічні ефекти.

Приріст
температури $\Delta\theta$
в зразку
ілюструється на
рис.6 кривою 1.

Вихідні для
розрахунків
точні (крива 3)
та наближені за
Гопкінсоном
(крива 2)
значення

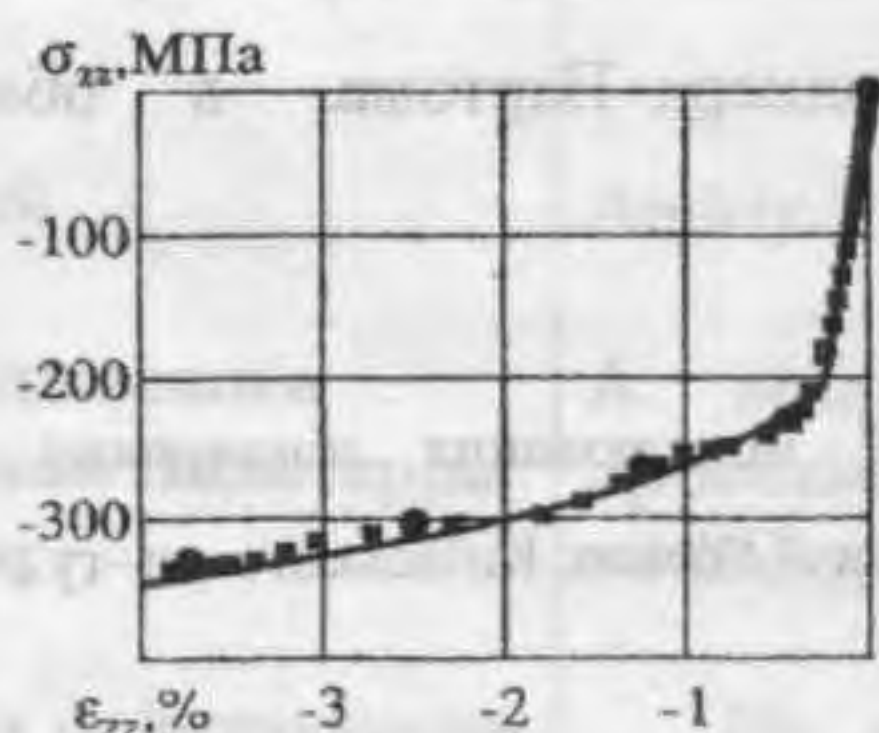


Рис. 2

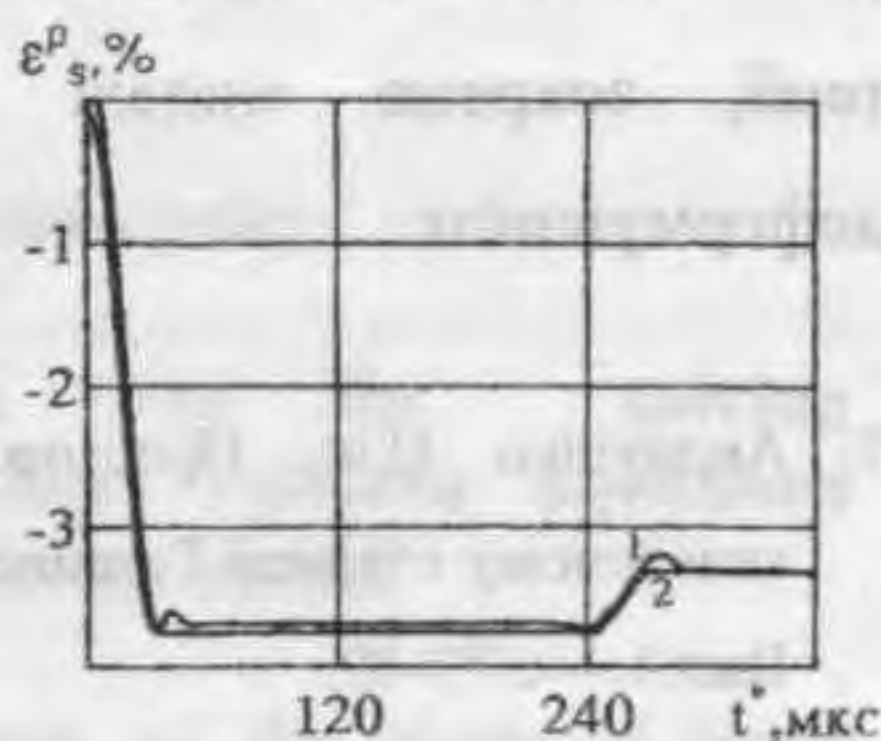


Рис. 3

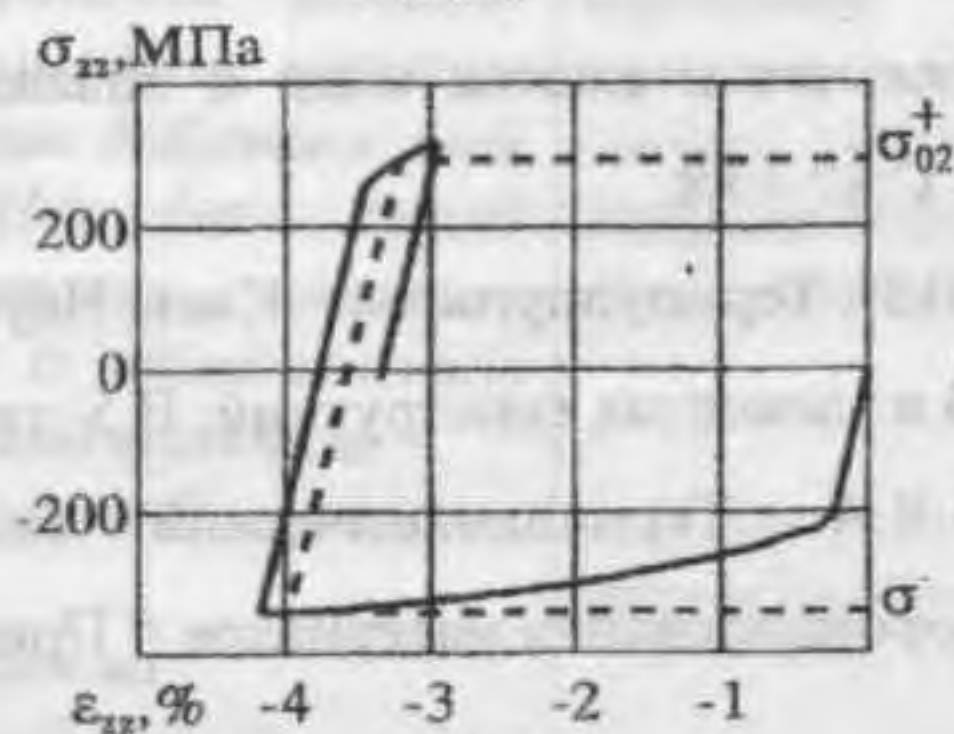


Рис. 4

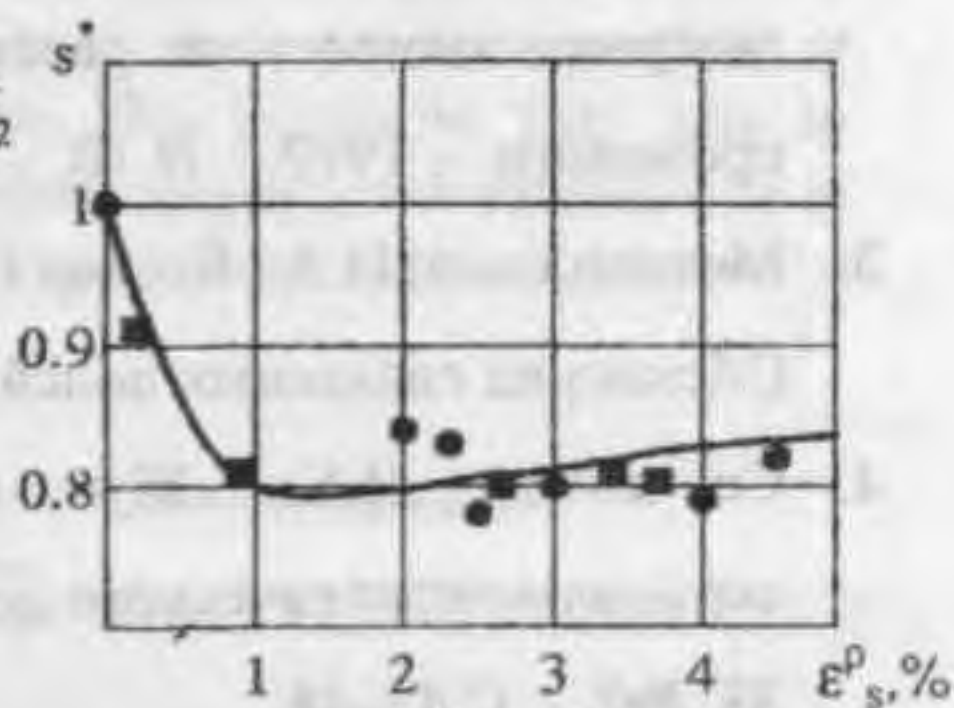


Рис. 5

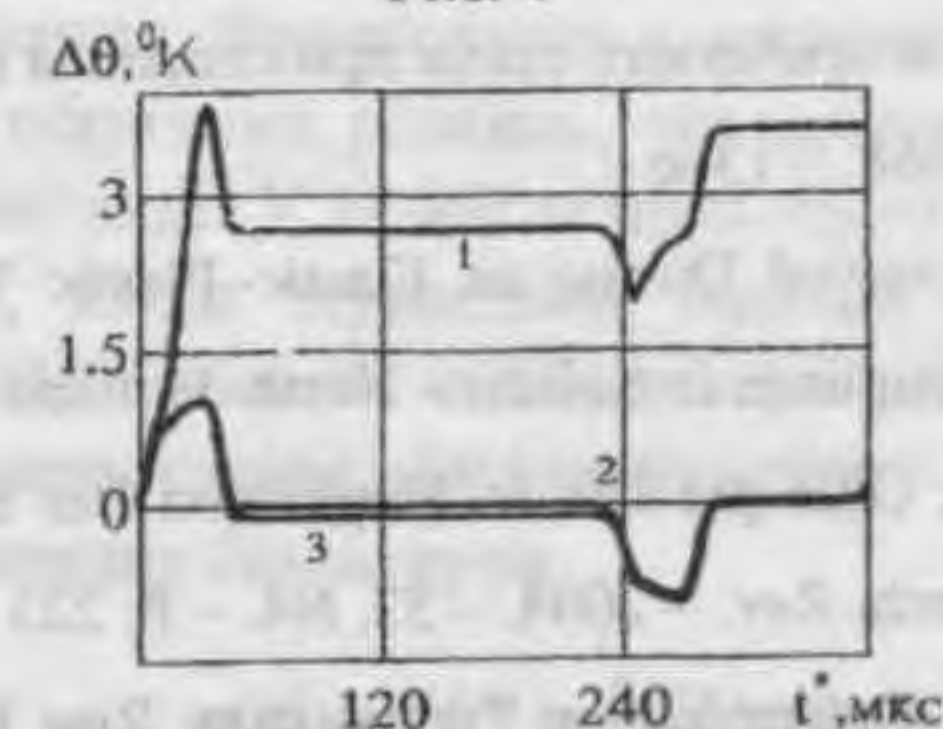


Рис. 6

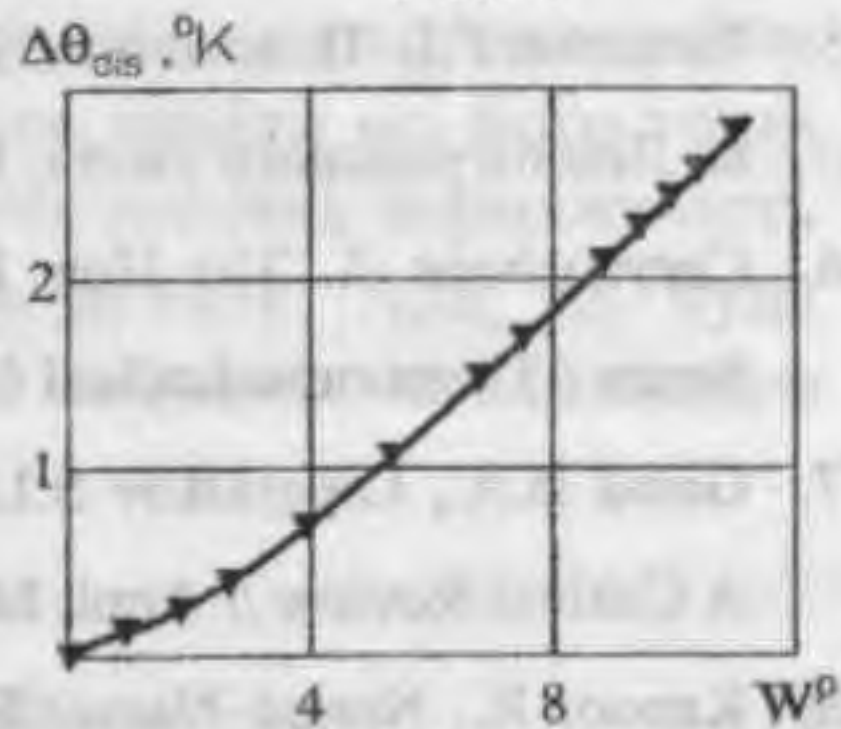


Рис. 7

термопружної складової співпадають на першому активному етапі і
незначно відрізняються на другому. Цим змінам відповідають імпульси

$\Delta\theta_{the} \approx \pm 1^\circ K$. На рис.7 представлено залежність $\Delta\theta_{dis}$ від непружної

роботи W^p на першому активному етапі навантажування в хвилі стиску.

Тут суцільною кривою позначено точні, а трикутниками наближені дані,

W^p вимірюється в МДж/м³. Використовуючи розраховану за стержньовою

теорією дисипативну складову температури і вираз (22) знаходимо

$c = 1,54$ та $d = 1,48$. Відхилення отриманих значень від вихідних не

перевищує двох відсотків. Це свідчить про можливість застосування

розвиненого підходу для визначення параметрів термомеханічних моделей течії, зокрема моделі Боднера-Партома, в області швидкісного деформування.

1. Андрушко Н.Ф. Просторове моделювання поширення непружних хвиль в складеному стержні Гопкінсона // Вісник Київського ун-ту., Сер.: ф.-м.н. – 2005. – Вип.1. – с.73–82.
2. Большаков А.П., Новиков С.А., Сеницын В.А. Исследование динамических диаграмм одноосного растяжения и сжатия меди и сплава АМг-6 // Проблемы прочности. – 1979. – N 10. – С.87 – 88.
3. Мотовиловец И.А., Козлов В.И. Термоупругость. – Киев: Наук.думка, 1987. – 264с. – (Механика связанных полей в элементах конструкций: В 5-ти т.; т.1).
4. Сенченков И.К., Жук Я.А. Термодинамический анализ одной модели термовязкопластического деформирования материалов // Прикл. механика – 1997. – 33, №2. – С.41–48.
5. Талыпов Г.Б. Пластичность и прочность стали при сложном нагружении. – Л.: Изд-во Ленинградского ун-та, 1968. – 135с.
6. Chrysochoos A. The Heat Evolved During an Elastic-Plastic Transformation at Finite Strain / Thermomechanical Couplings in Solids. – North-Holland, 1987. – P.79 – 84.
7. Gama B.A., Lopatnikov S.L., Gillespie J.W.Jr. Hopkinson Bar Experimental Technique: A Critical Review // Appl. Mech. Rev. – 2004. – 57, N4. – P. 223 – 249.
8. Kapoor R., Nemat-Nasser S. Determination Temperature Rise During High Strain Rate Deformation // Mech. of Materials. – 1998. – 27, N 1. – P.1 – 12.
9. Kim G., Im S. Approximate Analysis of a Shear Band in Thermoviscoplastic Material // TRANS ASME J. Appl. Mech. – 1999. – 66, N 3. – P.677 – 694.
10. Loushe H., Chrysochoos A. Thermal and Dissipative Effects Accompanying Luders Band Propagation // Materials Sci. and Eng. – 2001. – 307. – P.15–22.
11. Senchenkov I.K., Zhuk Ya.A., Karnaukhov V.G. Modelling the Thermomechanical Behaviour of Physically Non-linear Materials under Monoharmonic Loading // Int. Appl. Mech. – 2004. – 40, N 9. – P.943 – 969.

Надійшла до редколегії 24.02.2006.

УДК 517

Андрій Юрачківський

Andriy Yurachkivsky

**Простий спосіб наближеного
розв'язування рівнянь Вольтерра
з виродженим ядром**

**A simple way for solving
approximately Volterra equations
with degenerate kernel**

У системі лінійних диференціальних рівнянь, до якої зводиться рівняння Вольтерра з виродженим ядром, матриця коефіцієнтів є тензорним добутком двох змінних векторів. Це дає спосіб наближеного інтегрування системи шляхом заміни одного із співмножників кусково сталою векторною функцією.

The matrix of the system of linear differential equations which Volterra equation reduces to is a tensor product of varying vectors. This yields the way how to integrate it approximately, substituting one of the factors by a piecewise constant function.

Ключові слова: рівняння Вольтерра, наближення.

Key words: Volterra equation, approximation.

E-mail: yur@univ.kiev.ua

Як відомо, рівняння Фредгольма з виродженим ядром рівносильне системі лінійних алгебричних рівнянь, що дозволяє знайти всі його точні розв'язки в явному вигляді. У теорії ж вольтеррових рівнянь виродженість ядра нічого не дає, якщо шукається точний розв'язок. Але, як буде показано в цій статті, її можна використати для побудови наближеного розв'язку способом, простішим ніж ітерування.

Розглядаємо рівняння Вольтерра

$$x(t) = f(t) + \int_0^t K(t,s)x(s)ds, \quad (1)$$

де

$$K(t,s) = p(t)q(s), \quad (2)$$

f, p і q – задані неперервні функції, перша з яких скалярна, а інші дві векторні однакової розмірності n . Щоб інтерпретувати праву частину (2) як скалярний добуток, вважаємо $p(t)$ рядком, а $q(s)$ стовпчиком.

Позначимо

$$A = qp, \quad (3)$$

$$g(t) = \int_0^t q(s)f(s)ds, \quad y(t) = \int_0^t q(s)x(s)ds. \quad \text{Тоді, зважаючи на (1) і (2),}$$

$$x(t) = f(t) + p(t)y(t). \quad (4)$$

Таким чином, щоб розв'язати, точно чи наближено, рівняння (1), достатньо знайти (в такому ж розумінні) функцію y . Замінивши в (4) t на s , помноживши (для наочності – зліва) обидві частини рівності на $q(s)$ і проінтегрувавши, дістанемо для y рівняння

$$y(t) = g(t) + \int_0^t A(s)y(s)ds. \quad (5)$$

Будемо розв'язувати його наближено, апроксимуючи функцію A такими, для яких рівняння виду (5) інтегрується у квадратурах. Наступна лема обґрунтовує цей підхід.

Лема 1. Нехай g – неперервна векторна функція, A і $\bar{A}$ – кусково неперервні матричні функції, y і $\bar{y}$ – розв'язки рівнянь (5) і

$$\bar{y}(t) = g(t) + \int_0^t \bar{A}(s)\bar{y}(s)ds$$

відповідно. Тоді для будь-якого $t > 0$

$$\max_{s \leq t} |y(s) - \bar{y}(s)| \leq G(t)L(t)e^{M(t) + \bar{M}(t)}, \quad (6)$$

де $L(t) = \int_0^t \|A(s) - \bar{A}(s)\|ds$, $M(t) = \int_0^t \|A(s)\|ds$, $\bar{M}(t) = \int_0^t \|\bar{A}(s)\|ds$.

Доведення. З (5) за лемою Гронуола – Белмана одержуємо

$$\max_{s \leq t} |y(s)| \leq G(t)e^{M(t)},$$

звідки, записавши тотожність

$$y(s) - \bar{y}(s) = \int_0^s (A(u) - \bar{A}(u))du + \int_0^s \bar{A}(u)(y(u) - \bar{y}(u))du,$$

виводимо за тією ж лемою нерівність (6). $\square$

Лема 1 дозволяє використовувати для A будь-які кусково неперервні наближення за нормою простору L_1 . Зрозуміло, їх треба вибирати так, щоб величина $L(t)$ була якомога меншою, тому кусково сталі наближення явно не найкращі. Рівність (2) наводить на думку апроксимувати кусково сталими функціями тільки один із співмножників тензорного добутку. Це буде виправданим лише за умови, що рівняння (5) з функцією виду (3), де одна з функцій p або q кусково стала, інтегрується у квадратурах. Дві теореми статті показують, що це справді так.

Теорема 1. Нехай a – сталий вектор-стовпчик розмірності n , p – неперервна функція зі значеннями в просторі n -мірних вектор-рядків. Тоді розв'язок диференціального рівняння

$$\dot{Y}(t) = ap(t)Y(t) \quad (7)$$

відносно матричної функції Y виражається через значення останньої в довільній точці t_0 за формулою

$$Y(t) = \Omega(t, t_0)Y(t_0), \quad (8)$$

де

$$\Omega(t, t_0) = ae^{P(t)a} \int_0^t e^{-P(s)a} p(s) ds + I, \quad (9)$$

$P(t) = \int p(t) dt$, I – одинична матриця.

Доведення. Без обмеження загальності $|a| = 1$ (бо поділивши a і помноживши $p(t)$ на однакове число, не змінимо рівність (7)). Тоді існує ортогональна матриця з останнім рядком a^T . Зафіксуємо таку матрицю B і позначимо $r = pB^T$, $Z = BY$, так що $pY = rZ$. Помноживши обидві частини (7) зліва на B , дістанемо для Z рівняння

$$\dot{Z}(t) = Bar(t)Z(t). \quad (10)$$

Очевидно, вектор Ba співпадає з останнім стовпчиком одиничної матриці. Тому, позначивши i -й рядок матриці Z через Z^i , а i -ту компоненту вектора r через r_i і ввівши для r_n індивідуальне позначення ρ , можемо переписати (10) як систему векторних диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \dot{z}^i = 0, & i = 1, \dots, n-1, \\ \dot{z}^n = \sum_{j=1}^{n-1} r_j z^j + \rho z^n. \end{cases}$$

Розв'язок останньої виражається через початкові умови в точці t_0 рівностями

$$z^i(t) = z^i(t_0), \quad i = 1, \dots, n-1,$$

$$z^n(t) = \sum_{j=1}^{n-1} e^{R(t)} \int_{t_0}^t e^{-R(s)} r_j(s) z^j(t_0) ds + e^{R(t)-R(t_0)} z^n(t_0),$$

де $R(t) = \int \rho(t) dt$. Зауваживши, що $e^{R(t)-R(t_0)} = e^{R(t)} \int_{t_0}^t e^{-R(s)} \rho(s) ds + 1$,

можемо записати ці n векторних рівностей як одну матричну:

$$Z(t) = \Theta(t, t_0)Z(t_0),$$

де

$$\Theta(t, t_0) = B a e^{R(t)} \int_{t_0}^t e^{-R(s)} r(s) ds + I. \quad (11)$$

З огляду на зв'язок між Y і Z функція Ω з формули (8) пов'язана з Θ рівністю $\Omega = B^T \Theta B$. Тепер, щоб вивести (9) з (11), достатньо зауважити, що $\rho = rBa \equiv pa$. $\square$

Аналогічно доводиться

Теорема 2. Нехай b – сталий вектор-рядок розмірності n , q – неперервна функція зі значеннями в просторі n -мірних вектор-стовпчиків. Тоді розв'язок диференціального рівняння

$$\dot{Y}(t) = q(t)bY(t)$$

відносно матричної функції Y виражається через значення останньої в довільній точці t_0 за формулою (8), де

$$\Omega(t, t_0) = e^{bQ(t)} \int_{t_0}^t e^{-bQ(s)} q(s)b ds + I, \quad Q(t) = \int q(t) dt.$$

Надійшла до редакції 10.03.2006

ИНФОРМАТИКА

$$p_k(z) = \sum_{j=0}^k a_{kj} z^j, \quad a_{kj} \in \mathbb{C}, \quad a_{k0} \neq 0, \quad k=0,1,2,\dots$$

Пусть $\{p_k(z)\}_{k=0}^\infty$ — последовательность полиномов, удовлетворяющая условиям:

1. $p_k(z)$ — полином степени k .

2. $p_k(z)$ — полином, удовлетворяющий условиям:

$$p_k(z) = p_k^*(z) \quad (1)$$

где $p_k^*(z) = \overline{p_k(\overline{z})}$ — сопряженный полином.

КОМИТЕТ НАУКИ ТА ИНФОРМАТИКА

Ученый совет

УДК 681.3.06

Дмитро Б. Буй¹
Надія Д. Кахута²

**Властивості відношення
конфінальності та устрій множини
часткових функцій**

Розглядаються властивості
теоретико-множинного відношення
конфінальності (коініціальності) та
устрій множини часткових функцій,
впорядкованих за включенням графіків.

Ключові слова: відношення
конфінальності, часткові функції.

Dmytro B. Buy¹
Nadiy D. Kakhuta²

**Properties of confinality relation and
structure of the set of partial
functions**

Properties of the set-theoretical
confinality (coinitiality) relation and the
structure of the set of partial function, which
are ordered by their graphs, are considered.

Key words: confinality relation, partial
functions.

¹ E-mail: buy@unicyb.kiev.ua

² E-mail: vkahuta@iba.com.ua

Стаття продовжує дослідження роботи [1] про загальні властивості теоретико-множинних конструкцій, що використовуються в теорії реляційних баз даних, і присвячена властивостям теоретико-множинних відношень конфінальності та коініціальності та устрою множини часткових функцій, впорядкованих за включенням їхніх графіків. Як і для повного образу та обмеження, дослідженим в [1], вибір саме цих конструкцій обумовлений, по-перше, їхньою загальнозначністю та, по-друге, природним застосуванням в теорії реляційних баз даних при дослідженні табличних алгебр, побудованих на основі відомих реляційних алгебр Кодда [1-4; 5, підрозд. 1.3, с. 22-24]. В статті наведені всі доведення, а також узагальнені деякі твердження, наведені в згаданих роботах. В роботі використовуються ті самі позначення що і в [1].

Бінарне відношення конфінальності множин. Зафіксуємо частковий порядок $\leq$ на універсумі D . Цей порядок індукує бінарне відношення конфінальності $<$ на булеані універсуму $P(D)$:

$$\text{def } X < Y \Leftrightarrow \forall x(x \in X \Rightarrow \exists y(y \in Y \& x \leq y)).$$

Зауважимо, що за термінологією [6, розд. I, § 2, с. 39] відношення $X < Y$ означає, що множина Y конфінальна множині X . Введене відношення рефлексивне, транзитивне, має найменшим елементом порожню множину $\emptyset$. Отже, для того, щоб бути частковим порядком, не вистачає властивості антисиметричності. Тому розглянемо обмеження цього відношення.

Множину X назвемо *дискретною*, якщо частково впорядкована множина $\langle X, \leq \rangle$ (за індукованим порядком) дискретна в звичайному розумінні [7, § 1], тобто для всіх $x_1, x_2 \in X$ виконується імплікація $x_1 \leq x_2 \Rightarrow x_1 = x_2$.

Твердження 1. Відношення конфінальності частково впорядковує сім'ю дискретних множин. $\square$

Доведення. Очевидно, достатньо встановити антисиметричність відношення на дискретних множинах. Нехай $X \prec Y$ та $Y \prec X$, причому множини X, Y дискретні. Розглянемо довільний елемент $x \in X$. Тоді знайдуться елементи $y \in Y$ і $z \in X$ такі, що $x \leq y \leq z$; звідки, враховуючи транзитивність відношення $\leq$, отримуємо $x \leq z$. Але x, z – елементи дискретної множини X , тобто $x = z$. Таким чином, $x \leq y \leq x$, звідки $x = y$. Отже, $x \in Y$, тобто включення $X \subseteq Y$ доведене. Обернене включення $Y \subseteq X$ встановлюється повністю аналогічно. $\square$

Нагадаймо, що два відношення та таблицях, які розглядаються в [3; 5, підрозділи 2.6, 2.8], будуються саме за наведеною схемою.

Наведемо загальні властивості відношення конфінальності, позначаючи верхній (нижній) конус множини X як X^Δ (відповідно X^∇), а супремум (інфімум) цієї ж множини як $\coprod X$ (відповідно $\prod X$).

Твердження 2. Для довільних множин виконується імплікація $X \prec Y \Rightarrow Y^\Delta \subseteq X^\Delta$. $\square$

Доведення очевидне. $\square$

Наслідок 1. Для довільних множин за умови існування їхніх супремумів виконується імплікація $X \prec Y \Rightarrow \coprod X \leq \coprod Y$. $\square$

Доведення випливає з попереднього твердження та означення супремумів. $\square$

В літературі поняття конфінальності найчастіше використовується для конфінальних підмножин в наступному розумінні: множину Y назвемо *конфінальною підмножиною* множини X , якщо $Y \subseteq X$ та $X \prec Y$.

Основна властивість конфінальних підмножин полягає в наступному.

Твердження 3. Якщо Y конфінальна підмножина множини X , то верхні конуси цих множин співпадають – $X^\Delta = Y^\Delta$; тобто виконується узагальнена рівність $\coprod X = \coprod Y$. $\square$

Доведення. Нехай $X \prec Y$ та $Y \subseteq X$, тоді за твердженням 2 $Y^\Delta \subseteq X^\Delta$. Крім того, за загальними властивостями конусів $Y^\Delta \supseteq X^\Delta$ [7, § 1, теорема 5, с. 11]. Значить, ці верхні конуси співпадають; узагальнена ж рівність випливає просто з означення точних граней. $\square$

Таким чином, питання про супремум множини еквівалентне тому ж питанню для конфінальної підмножини.

Зауважимо, що незважаючи на простоту, природність та потужність властивостей конфінальних підмножин (твердження 3), в явному вигляді вони відсутні в літературі (див., наприклад, [7, § 1; 6, розд. 1, § 2; 8, розд. III, § 1, п. 7 та § 6, п. 5 з зведення результатів]). На останок додамо, що згідно з принципом двоїстості при переході до оберненого (інверсного) порядку всі твердження для конфінальності переходять в твердження для коініціальності (з заміною верхніх конусів на нижні, супремумів на інфімуми). Наведемо відповідні означення та аналоги вищенаведених тверджень.

Бінарне відношення коініціальності множин. При зафіксованому частковому порядку $\leq$ на універсумі D бінарне відношення коініціальності $\triangleleft$ на булеані універсуму $P(D)$ вводиться так: $X \triangleleft Y \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} \forall x(x \in X \Rightarrow \exists y(y \in Y \& y \leq x))$.

Твердження 1'. Відношення коініціальності частково впорядковує сім'ю дискретних множин. $\square$

Твердження 2'. Для довільних множин виконується імплікація $X \triangleleft Y \Rightarrow Y^\nabla \subseteq X^\nabla$. $\square$

Наслідок 1'. Для довільних множин за умови існування їхніх інфімумів виконується імплікація $X \triangleleft Y \Rightarrow \prod Y \leq \prod X$. $\square$

Множину Y назвемо коініціальною підмножиною множини X , якщо $Y \subseteq X$ та $X \triangleleft Y$.

Твердження 3'. Якщо Y – коініціальна підмножина множини X , то нижні конуси цих множин співпадають – $X^\nabla = Y^\nabla$; тобто виконується узагальнена рівність $\prod X \approx \prod Y$. $\square$

Устрій множини часткових функцій. Розглянемо устрій частково впорядкованої множини (далі ч. в. м.) часткових функцій, впорядкованих за включенням їхніх графіків. Далі будемо говорити про функції, маючи на увазі часткові функції.

Введемо бінарне відношення сумісності відношень, зокрема функцій: $U \approx V \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} U|X = V|X$, де $X \stackrel{\text{def}}{=} \pi_1^2 U \cap \pi_1^2 V$ – перетин проєкцій вихідних відношень за першою компонентою.

Очевидно, що відношення сумісності рефлексивне, симетричне, але не транзитивне, взагалі кажучи; також очевидно, що порожнє відношення сумісне з довільним відношенням – $\varepsilon \approx U$, оскільки обмеження зберігає порожню множину [1, твердження 6, п. 3].

Далі знадобиться поняття сумісної множини функцій: множину функцій F назвемо сумісною, якщо для довільної скінченної підмножини $\{f_1, \dots, f_n\} \subseteq F$ існує функція h , така, що $f_1, \dots, f_n \subseteq h$ (іншими словами, довільна скінченна підмножина множини F обмежена зверху).

Очевидно, що при об'єднанні функцій властивість функціональності, взагалі кажучи, порушується. Наступна лема дає відповідний критерій.

Лема 1 (критерій функціональності об'єднання двох функцій). Для довільних функцій f, g наступні чотири твердження еквівалентні:

1. $f \approx g$,
2. $f \cup g$ – функція,
3. $\{f, g\}$ – сумісна множина,
4. $g|_{\text{dom}f} \subseteq f$ (або $f|_{\text{dom}g} \subseteq g$). $\square$

Доведення. Встановимо ланцюжок імплікацій $1 \Rightarrow 2 \Rightarrow 3 \Rightarrow 4 \Rightarrow 1$. Імплікацію $1 \Rightarrow 2$ перевіримо від супротивного: нехай $f \approx g$, але об'єднання $f \cup g$ не є функціональним відношенням, тобто існують елементи x, y, z , такі, що $\langle x, y \rangle, \langle x, z \rangle \in f \cup g$, причому $y \neq z$. Очевидно, що $\langle x, y \rangle \in f, \langle x, z \rangle \in g$ (або навпаки), тобто $x \in X$, де $X = \text{dom}f \cap \text{dom}g$. Звідси випливає, що $\langle x, y \rangle \in f|_X = g|_X$; таким чином, $\langle x, y \rangle \in g$, що з огляду на належність $\langle x, z \rangle \in g$ та нерівність $y \neq z$ суперечить функціональності g . $\square$

Імплікація $2 \Rightarrow 3$ тривіальна, оскільки функція $f \cup g$ і є верхньою гранню множини $\{f, g\}$. $\square$

Переходимо до імплікації $3 \Rightarrow 4$. Нехай $\{f, g\}$ – сумісна множина, тоді існує функція h така, що $f, g \subseteq h$. Згідно з пп. 1 та 9 твердження 6 з [1] маємо рівність $f = h|_{\text{dom}f}$ та включення $g|_{\text{dom}f} \subseteq h|_{\text{dom}f}$; отже, $g|_{\text{dom}f} \subseteq f$. $\square$

Доведемо останню імплікацію $4 \Rightarrow 1$. Нехай $g|_{\text{dom}f} \subseteq f = f|_{\text{dom}f}$ (справа застосували представлення відношення через обмеження за своєю проекцією за першою компонентою [1, твердження 6, п. 4]); візьмемо обмеження за множиною $\text{dom}g$ від обох частин нерівності, згідно з монотонністю обмеження ([1, твердження 6, п. 1]) нерівність збережеться тобто $(g|_{\text{dom}f})|_{\text{dom}g} \subseteq (f|_{\text{dom}f})|_{\text{dom}g}$; $g|(\text{dom}f \cap \text{dom}g) \subseteq f|(\text{dom}f \cap \text{dom}g)$ (композиція обмежень, [1, твердження 6, п. 5]). Таким чином, $g|_X \subseteq f|_X$, де $X = \text{dom}f \cap \text{dom}g$; звідси за [1, твердження 6, п. 9] виконується шукана рівність $g|_X = f|_X$, оскільки функції $g|_X, f|_X$ мають однакову область означеності X , що випливає з [1, твердження 6, п. 2]. $\square$

Зауважимо, що коректне ведення операції з'єднання таблиць базується саме на функціональності об'єднання сумісних функцій:

$$t_1 \otimes t_2 = \{s_1 \cup s_2 \mid s_1 \in t_1 \wedge s_2 \in t_2 \wedge s_1 \approx s_2\}.$$

Далі порожнє відношення ε з огляду на його функціональність будемо позначати $f_\emptyset$ і називати всюди невизначеною функцією. Множину всіх часткових функцій на універсумі позначимо F .

Твердження 4. (устрій ч. в. м. часткових функцій). Виконуються наступні твердження:

1. $f_\emptyset$ – найменший елемент ч. в. м. $\langle F, \subseteq \rangle$; ця ч. в. м. має найбільший елемент тоді і тільки тоді, коли універсум D має щонайбільше один елемент;

2. $\prod F = \bigcap_{f \in F} f$ для довільної непорожньої множини функцій $F \subseteq F$;

3. наступні твердження еквівалентні для довільної множини функцій F :

а) супремум $\prod F$ існує;

б) множина F обмежена зверху;

в) множина F сумісна;

г) всі функції множини F попарно сумісні: $\forall f \forall g (f, g \in F \Rightarrow f \approx g)$;

д) відношення $\bigcup_{f \in F} f$ – функціональне;

4. $\prod F = \bigcup_{f \in F} f$ за умови існування супремума, де F довільна множина функцій,

зокрема, порожня; при цьому $\prod \emptyset = \bigcup_{f \in \emptyset} f \stackrel{\text{def}}{=} f_\emptyset^1$. $\square$

Доведення. Перше твердження п. 1 очевидне. Доведемо друге. Почнемо з достатності. Якщо універсум порожній, то множина F містить тільки всюди невизначену функцію, а якщо універсум одноелементний (нехай, наприклад,

для визначеності $D = \{x\}$), то множина F містить тільки всюди невизначену функцію та діагональ ($F = \{f_\emptyset, \{ \langle x, x \rangle \} \}$); в обох випадках найбільший елемент існує.

Необхідність доводиться від супротивного: нехай існує найбільший елемент 1 , але існують два різних елементи універсуму x, y ; тоді $\{ \langle x, x \rangle \}, \{ \langle x, y \rangle \} \subseteq 1$, отже $\{ \langle x, x \rangle, \langle x, y \rangle \} \subseteq 1$, що суперечить функціональності відношення 1 .

Як бачимо, найбільший елемент існує тільки в тривіальному випадку не більш ніж одноелементного універсуму.^о

Другий пункт встановлюється безпосередньо; зауважимо, що непорожність множини F тут суттєва: дійсно, супремум $\prod \emptyset$ збігається з найбільшим елементом, який згідно з попереднім п. 1 існує тільки в

¹ Це стандартна домовленість щодо об'єднання порожньої сім'ї множин.

спеціальному випадку (крім того, треба ще домовлятися про значення виразу $\bigcap_{f \in \emptyset} f$).^а

Третій пункт доводиться встановленням ланцюжка імплікацій $a) \Rightarrow b) \Rightarrow c) \Rightarrow d) \Rightarrow a)$. Дійсно, імплікація $a) \Rightarrow b)$ тривіальна. Імплікація $b) \Rightarrow c)$ випливає з того, що довільна верхня грань множини F буде верхньою гранню і будь-якої (скінченної) підмножини цієї множини. Імплікація $c) \Rightarrow d)$ випливає з леми 1. Імплікація $d) \Rightarrow a)$ доводиться від супротивного з використанням тієї ж леми 1: дійсно, нехай об'єднання $\bigcup_{f \in F} f$ не функціональне, тоді найдуться пари $\langle x, y \rangle, \langle x, z \rangle$ та функції $f_1, f_2 \in F$, такі, що $\langle x, y \rangle \in f_1, \langle x, z \rangle \in f_2$, причому $y \neq z$; оскільки $f_1 \cup f_2$ не функція, то $f_1 \neq f_2$ згідно з лемою 1 – протиріччя. Нарешті, імплікація $d) \Rightarrow a)$ встановлюється безпосередньо, причому неважко довести, що об'єднання $\bigcup_{f \in F} f$ і буде супремумом множини F .^а

Четвертий пункт встановлюється безпосередньо з використанням еквівалентності $a) \Leftrightarrow d)$ третього пункту. $\square$

Таким чином, в ч. в. м. часткових функцій поняття сумісної множини співпадає з поняттям обмеженої зверху множини; причому супремуми існують для сумісних (обмежених зверху) множин і тільки для таких множин. Далі буде розглянута загальна ситуація в термінах когерентних множин та повних піврешіток.

Індуктивні множини, повні частково впорядковані множини, когерентні множини. Вкажемо належність ч. в. м. $\langle F, \subseteq \rangle$ до відомих класів ч. в. м. Наведемо відповідні означення в загальному випадку.

Нехай $\langle D, \leq \rangle$ – ч. в. м., а $X \subseteq D$. Підмножина X називається *ланцюгом* (направленою множиною), якщо для довільних її елементів x, y виконується $x \leq y \vee y \leq x$ (відповідно, $\exists z (z \in X \wedge x \leq z \wedge y \leq z)$). Підмножина X називається *сумісною множиною*, якщо для довільної її скінченної підмножини Y виконується $\exists z (z \in D \wedge \forall y (y \in Y \Rightarrow y \leq z))$, тобто $Y_D^\Delta \neq \emptyset$ (підмножина Y обмежена зверху в D).

Очевидно, що всякий ланцюг буде направленою множиною, а всяка направлена множина сумісна; обернені твердження, взагалі кажучи, хибні.

Ч. в. м. $\langle D, \leq \rangle$ назовемо *індуктивною* (повною частково впорядкованою множиною – п. ч. в. м., *когерентною*), якщо її довільний ланцюг (відповідно довільна направлена множина, довільна сумісна множина) має супремум.

Зауважимо, що у так визначеній індуктивній множині (п. ч. в. м., когерентній множині) існує найменший елемент (або за іншою термінологією «дно») $\perp$, оскільки найменший елемент збігається з супремумом порожньої

множини, яка є одночасно ланцюгом, направленою множиною та сумісною множиною. Рівність $\prod \emptyset = 1$ випливає з того, що верхній конус порожньої множини збігається з універсумом – $\emptyset^\Delta = D$.

На відміну від [7, § 1; 6, розд. 1, § 2] ми розглядаємо конуси і порожньої множини, покладаючи $\emptyset^\nabla = \emptyset^\Delta = D$. Таке визначення дуже природне, оскільки, по-перше, повністю відповідає означенню конусів (наприклад, для верхнього конуса $X^\Delta \stackrel{\text{def}}{=} \{y | \forall x (x \in X \Rightarrow y \geq x)\}$) та, по-друге, прояснює домовленості щодо точних граней порожньої множини – $\prod \emptyset = 1$ (найменший елемент), $\prod \emptyset = 1$ (найбільший елемент).

З огляду на вказаний вище логічний зв'язок між ланцюгами, направленими та сумісними множинами очевидно, що довільна когерентна ч. в. м. буде п. ч. в. м., а в свою чергу, довільна п. ч. в. м. буде індуктивною ч. в. м. Зазначимо, що в [9, розд. 1, § 1.2] когерентні ч. в. м. вводяться як п. ч. в. м., в яких довільні сумісні множини мають супремуми; очевидно, що це означення еквівалентне вищенаведеному.

Але виявляється, що класи п. ч. в. м. та індуктивних ч. в. м. насправді співпадають, оскільки в довільній ч. в. м. існування супремумів любых непорожніх направлених множин еквівалентно існуванню супремумів любых непорожніх ланцюгів [10, розд. I, § 5, твердження 5.9]. Це твердження є дуже нетривіальним, а доведення для загального випадку використовує аксіому вибору. Разом з тим для злічених універсумів ситуація суттєво спрощується, оскільки злічені направлені множини містять конфінальні ланцюги, що, взагалі кажучи, не виконується для незлічених направлених множин.

Твердження 5. Злічена направлена множина містить конфінальний ланцюг. Існує (незлічена) направлена множина, що не містить конфінальних ланцюгів. Довільний ланцюг містить конфінальну цілком упорядковану підмножину. $\square$

Доведення. Перше твердження. Нехай $X = \{x_0, x_1, x_2, \dots\}$ – злічена направлена множина. Індукцією по $n = 0, 1, 2, \dots$ побудуємо множину $Y = \{y_0, y_1, y_2, \dots\}$, таку, що $Y \subseteq X$, $X < Y$ та $y_0 \leq y_1 \leq y_2 \leq \dots$.

Базис індукції: $y_0 \stackrel{\text{def}}{=} x_0$. Індуктивний крок: нехай елементи $y_0, y_1, \dots, y_n \in X$ вже побудовані, причому $\{x_0, x_1, \dots, x_n\} < \{y_0, y_1, \dots, y_n\}$, $y_0 \leq y_1 \leq \dots \leq y_n$. Оскільки, y_n, x_{n+1} належать направленій множині X , то в ній існує елемент z , такий, що $y_n \leq z, x_{n+1} \leq z$. Покладемо $y_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} z$. Очевидно, що так побудована множина Y шуканий конфінальний ланцюг. $\circ$

Слідуючи [11, розд. 1, § 2, приклад 1.2.4 на с. 23-24], дамо відповідний приклад. Нехай M – множина всіх відображень множини натуральних чисел

N в себе, впорядкована так: $f_1 \leq f_2 \stackrel{\text{def}}{\Leftrightarrow} f_1 = f_2 \vee \forall n (f_1(n) < f_2(n))$. Очевидно, ч. в. м. $\langle M, \leq \rangle$ – направлена (дійсно, для довільних функцій f_1, f_2 відповідною функцією є, наприклад, функція, що задається термом $f_1(x) + f_2(x) + 1$).

Про довільний ланцюг C в цій ч. в. м. можна сказати таке: по-перше, C не більше ніж злічений², та, по-друге, існує така функція g , що $g \in C^\Delta \setminus C$ (тобто функція g строго більша всіх функцій ланцюга).

Перше твердження випливає з ін'єктивності відображення $f \mapsto f(0)$; друге – з застосування діагональної конструкції Кантора. Дійсно, для скінченних ланцюгів твердження очевидне, а для зліченного ланцюга C ,

покладаючи $C \stackrel{\text{def}}{=} \{f_n\}_{n \in N}$, за функцію g можна взяти, наприклад, таку функцію в термальній формі запису – $g(x) \stackrel{\text{def}}{=} f_x(x) + 1$. З останньої властивості ланцюгів і випливає шукане твердження. ◻

Останнє твердження щодо конфінальних підмножин ланцюгів для злічених ланцюгів доводиться аналогічно першому твердженню про конфінальні підмножини злічених направлених множин; в загальному випадку треба застосовувати аксіому вибору (див. [7, § 2, теорема 5, с. 26.]). ◻

Умовно повні ч. в. м., повні піврешітки. Повернемося до устрою ч. в. м. часткових функцій. Нам знадобляться ще два загальних класа ч. в. м.

Ч. в. м. назвемо *умовно повною*, якщо її довільна обмежена зверху та знизу множина має обидві точні грані [12, розд. V, § 3].

Ч. в. м. назвемо *повною піврешіткою*, якщо її довільна обмежена зверху множина має супремум [13, розд. 3, п. 3.19, с. 58]; зауважимо, що в згаданій монографії повні піврешітки (*complete semilattice*) вводяться як підклас п. ч. в. м. Оскільки порожня множина обмежена зверху (нагадаймо, що $\emptyset^\Delta = D$ – універсум), то в повній піврешітці існує найменший елемент.

Отже, згідно з твердженням 4 ч. в. м. $\langle F, \subseteq \rangle$ є одночасно умовно повною множиною, когерентною множиною та повною піврешіткою. Цей факт не випадковий, він є наслідком загального результату про збіжність вказаних понять на класі індуктивних множин, наведеного без доведення, наприклад, в [13, розд. 3, п. 3.20, лема, с. 58].

Перед тим, як дати відповідні доведення, сформулюємо узагальнення відомих фактів про точні грані.

Лема 2 (зв'язок між точними гранями). В довільній ч. в. м. виконуються узагальнені рівності $\coprod X \approx \prod X^\Delta$ та $\prod X \approx \coprod X^\nabla$. ◻

² Зауважимо, що в [11] під зліченими розуміються скінченні множини або нескінченні злічені множини.

Стандартне доведення для випадку непорожніх конусів непорожніх множин (див., наприклад, [7, § 1, теореми 7, 8, с. 12.]) треба поповнити розглядом випадків порожніх конусів з використанням узагальнених рівностей $\prod \emptyset \approx \perp$, $\prod \emptyset \approx 1$. Крім того треба розглянути і випадок порожньої множини X .

Розглянемо такі два особливі випадки для першої узагальненої рівності. Нехай $X = \emptyset$, тоді $X^\Delta = D$ (універсум). Значення зліва $\prod \emptyset$ визначене тоді і тільки тоді, коли існує найменший елемент $\perp$, і збігається з $\perp$ у випадку визначення: $\prod \emptyset \approx \perp$. Значення справа – $\prod D$, тому треба скористатися очевидною рівністю

$$D^\nabla = \begin{cases} \{\perp\}, \text{ якщо } \perp \text{ існує,} \\ \emptyset, \text{ інакше} \end{cases}$$

Як бачимо, узагальнена рівність виконується (суттєве існування або не існування найменшого елемента). ◻

Нехай тепер $X^\Delta = \emptyset$, тобто множина X необмежена і, значить її супремум не існує. Покажемо, що значення справа також невизначене. Дійсно, справа маємо інфімум $\prod \emptyset$, який (інфімум) збігається з найбільшим елементом, якщо такий елемент існує; або ж інфімум не існує, якщо не існує найбільшого елемента: $\prod \emptyset \approx 1$; але найбільший елемент не існує з огляду на необмеженість зверху множини X . ◻

Друга узагальнена рівність з формулювання леми впливає з першої з застосуванням принципу двоїстості. ◻

Отже, узагальнення відомих фактів полягає в знятті обмеження на непорожність множин та їхніх конусів, а також в застосуванні узагальненої рівності для компактного запису.

Лема 3 (про супремум об'єднання). Нехай $\{X_i\}_{i \in I}$ довільна сім'я підмножин універсуму, причому всі супремуми $\prod X_i$, $i \in I$ існують. Тоді виконується узагальнена рівність $\prod \bigcup_{i \in I} X_i \approx \prod \{\prod X_i \mid i \in I\}$. ◻

Доведення проводиться модифікацією стандартного доведення (див. наприклад, [8, розд. III, § 1, п. 9, твердження 6; 7, § 1, теорема 9; 14, розд. 2, § 2.5, с. 58]). ◻

Зауважимо, що у згаданих працях наведено послаблене формулювання: рівності супремумів встановлюється за умови існування супремума об'єднання $\bigcup_{i \in I} X_i$ та, відповідно, нічого не говориться для випадку, коли супремум такого об'єднання не існує (більш точно: у [8, розд. III, § 1, п. 9, твердження 6, с. 148] по суті наведена узагальнена рівність для випадку множини двоіндексованих елементів).

Лема 3 є аналогом для ч. в. м. відомих фактів аналізу щодо сум повторних та подвійних рядів (див., наприклад, [15, розд. 3, § 1, п. 1.8; 16, розд. IX, § 5]).

В наступному твердженні наведена характеристична ознака повних піврешіток в термінах інфімумів.

Твердження 6 (характеристична ознака повних піврешіток). Ч. в. м. є повної піврешіткою тоді і тільки тоді, коли в цій ч. в. м. існують інфімуми довільних непорожніх множин. $\square$

Доведення почнемо з необхідності. Нехай множина $X \neq \emptyset$, згідно з лемою 2 виконується узагальнена рівність $\prod X \simeq \prod X^\nabla$. Залишається встановити обмеженість зверху нижнього конуса X^∇ , тобто непорожність верхнього конуса вигляду $(X^\nabla)^\Delta$. Для цього треба застосувати відоме включення $X \subseteq X^{\nabla\Delta}$ (див., наприклад, [7, § 1, теорема 5, с. 11]). $\square$

Достатність безпосередньо випливає з рівності $\prod X \simeq \prod X^\Delta$ (лема 2). $\square$

Далі 2^X – множина всіх скінченних підмножин множини X .

Лема 4 (про супремуми сумісних множин в повних піврешітках). Нехай X – сумісна підмножина повної піврешітки, тоді виконується узагальнена рівність $\prod X \simeq \prod \{\prod Y \mid Y \in 2^X\}$, причому множина супремумів $\{\prod Y \mid Y \in 2^X\}$ направлена. $\square$

Доведення. Спочатку зауважимо, що довільна скінченна підмножина сумісної множини обмежена зверху, отже має супремум за означення повної піврешітки; таким чином, дійсно супремуми вигляду $\prod Y, Y \in 2^X$ існують. Очевидно, $X = \bigcup 2^X$ і залишається застосувати лему 3 про супремум об'єднання. $\square$

Покажемо, що множина $\{\prod Y \mid Y \in 2^X\}$ направлена. Дійсно, нехай $Y_1, Y_2 \in 2^X$, тоді $Y_1 \cup Y_2 \in 2^X$, причому $\prod Y_i \leq \prod (Y_1 \cup Y_2)$, $i=1,2$ згідно з добре відомими властивостями точних граней (див, наприклад, [7, § 1, теорема 6, с. 12]). $\square$

Очевидно, клас когерентних множин включається в клас повних піврешіток. Про обернене включення говорить наступне твердження.

Твердження 7. В класі індуктивних множин (еквівалентно: в класі п. ч. в. м.) всяка повна піврешітка є когерентною множиною. $\square$

Доведення спирається на лему 4. $\square$

Наслідок 2. В класі індуктивних множин (еквівалентно: в класі п. ч. в. м.) поняття повної піврешітки збігається з поняттям когерентної множини. $\square$

Це і є загальне твердження, яке проявляється для ч. в. м. часткових функцій. Подальші властивості ч. в. м. часткових функцій (компактні елементи, алгебраїчність, топологія Скотта, що співпадає з топологією додатної

інформації в розумінні [17, гл. 10, § 1, с. 195]) наведені, наприклад, в [9, підрозділ 1.2, твердження 1.2.31, с. 31; 18]. З приводу умовної повноти в решітках див. [12, гл. V, § 3, с. 153-154].

Література

1. Кахута Н. Д., Буй Д. Б. Властивості теоретико-множинних конструкцій повного образу та обмеження // Вісник Київського університету. Сер. фіз.-мат. науки. – 2005. – Вип. 2. – С. 232-240.
2. Редько В. Н., Буй Д. Б. К основаниям теории реляционных моделей баз данных // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №4. – С. 3-13.
3. Редько В. Н., Брона Ю. И., Буй Д. Б. Реляционные алгебры: операции проекции и соединения // Кибернетика и системный анализ. – 1997. – №4. – С. 89-100.
4. Редько В. Н., Брона Ю. И., Буй Д. Б. Реляционные алгебры: операции деления и переименования // Кибернетика и системный анализ. – 1997. – №5. – С. 3-15.
5. Редько В. Н., Брона Ю. И., Буй Д. Б., Поляков С. А. Реляційні бази даних: таблицні алгебри та SQL-подібні мови. – Київ: Видавничий дім "Академперіодика", 2001. – 198 с.
6. Общая алгебра. Т. 1 / Мельников О. В., Ремесленников В. Н., Романов В. А. и др. Под общ. ред. Л. А. Скорнякова. – Москва: Наука, 1990. – 592 с.
7. Скорняков Л. А. Элементы теории структур. – Москва: Наука, 1982. – 158 с.
8. Бурбаки Н. Теория множеств. – Москва: Мир, 1965. – 455 с.
9. Барендрегт Х. Ламбда-исчисление. Его синтаксис и семантика. – Москва: Мир, 1985. – 606 с.
10. Кон П. Универсальная алгебра. – Москва: Мир, 1968. – 351 с.
11. Архангельский А. В. Канторовская теория множеств. – Москва: Изд-во МГУ, 1988. – 112 с.
12. Биркгоф Г. Теория решеток. – Москва: Наука, 1984. – 564 с.
13. Davey B. A., Priestly H. A. Introduction to Lattice and Order. – Cambridge: Cambridge University Press, 1990. – 248 p.
14. Глушков В. М., Цейтлин Г. Е., Ющенко Е. Л. Алгебра. Языки. Программирование. 3-е изд, перераб. и доп. – Киев: Наукова думка, 1989. – 376 с.
15. Ляшко І. І., Ємельянов В. Ф., Боярчук О. К. Математичний аналіз. Частина І. – Київ: Вища школа, 1992. – 494 с.
16. Фихтенгольц Г. М. Курс дифференциального и интегрального исчисления. Т. II. – Москва: Наука, 1970. – 800 с.
17. Катленд Н. Вычислимость. Введение в теорию рекурсивных функций. – Москва: Мир, 1983. – 256 с.
18. Брона Ю. И., Буй Д. Б. О непрерывности композиций // Методы представления знаний в информационных технологиях. Сб. научн. тр. – Киев: Ин-т кибернетики АН УССР. – 1991. – С. 86-92.

Надійшла до редакції 12.03.06

УДК 004.932.72

Андрій П. Верченко¹,
Ольга Ф. Швець²

Andrew P. Verchenko¹,
Olga F. Shvets²

**Структурно-параметричний
підхід в задачах виділення
затінених ділянок на
аерознімках³**

**Structurally-parametric
approach in the problems of
selection of the shaded areas on
aerial images³**

В роботі розглядається проблема виділення тіней (затінених ділянок) з аерофотознімку. Для цього пропонується будувати гістограму відповідного сегментованого зображення та проводити її аналіз на основі структурно-параметричного підходу. Представлено огляд існуючих в літературі підходів до виділення тіней з цифрових зображень та окреслено місце запропонованого методу в цій класифікації.

The problem of shadows extraction according to aerial images is considered in work. For this purpose it is offered to construction the histogram of the corresponding segmented image and to spend its analysis on the basis of the structurally-parametric approach. It is presented the review of existing approaches shadows allocation according to digital images and the place of the offered method in this classification is described.

Ключові слова: цифрова обробка зображень, сегментація аерознімків, гістограма зображення, структурно-параметрична оптимізація.

Key words: digital image processing, aerial images segmentation, image histogram, structurally-parametric optimization.

¹ E-mail: verchenko@univ.kiev.ua

² E-mail: olgasv@univ.kiev.ua

Огляд проблеми. Задача цифрової обробки аерознімків високої роздільної здатності з метою класифікації інформації, що там міститься – є в даний момент дуже актуальною [1]. Тіні (затінені ділянки) з'являються на зображенні внаслідок невисокої висоти обльоту і спричиняють значні перешкоди при аналізі об'єктів, що містяться на знімку. Проблемі виділення тіней зі статичних цифрових зображень присвячено багато робіт (зокрема [2–3] для зображень загальної природи, та [4–7] для аерознімків).

Виявлення тіней на аерознімках дозволяє виділяти об'єкти, що мають висотну координату (і утворюють затінену ділянку) [6]. Інша важлива задача, що виникає при обробці цифрових аерознімків – відновлення первинної інформації, що міститься на затінених ділянках [4].

В роботах, що стосуються обробки аерознімків, тіні виділяються різними методами, зокрема шляхом модифікованого порогового відділення [5,4], відновленням розміру тіні з використанням цифрової моделі рельєфу

³ Дана робота виконана в рамках проектів Студентської Лабораторії з інформатики компанії International Land Systems (ILS), Inc. (USA), що створена при кафедрі моделювання складних систем факультету кібернетики Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

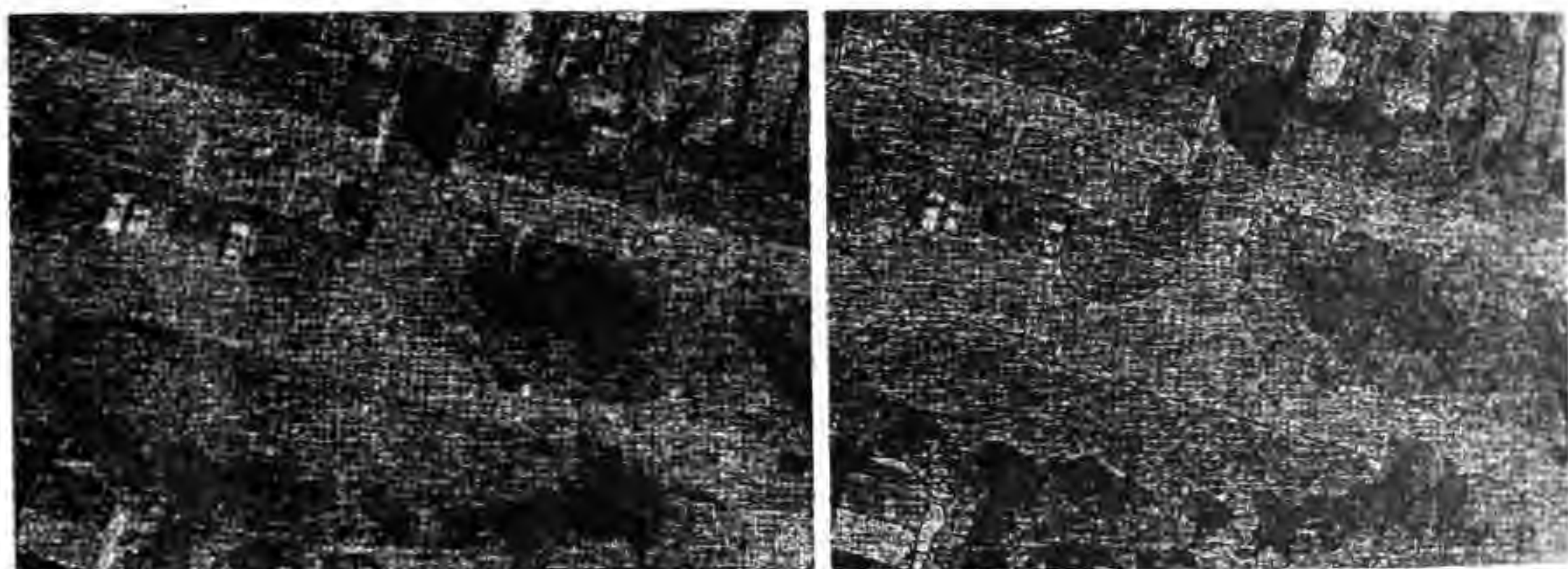
(digital terrain model або digital surface model) [7], з використанням інформації про параметри розташування Сонця (sun angle parameters) та базу даних з відомими об'єктами [6].

Один із простих та ефективних підходів до виділення тіней описаний в [4] і заключається у попередній сегментації зображення та у наступному аналізі його гістограми інтенсивностей. В роботах [4,5] встановлено відповідність зони тіней лівому суттєвому піку на гістограмі.

В даній статті пропонується новий метод виділення тіней, що є модифікацією описаного в [4] підходу з використанням структурно-параметричних методів для автоматичного виділення на гістограмі зони, яка відповідає затіненим ділянкам.

Опис алгоритму виділення затінених ділянок. Задача сегментації аерознімків є важливим етапом попередньої обробки цифрового зображення. Огляд методів сегментації можна знайти, наприклад, в [8–10]. В даній статті пропонується використовувати для сегментації метод, описаний в [9], який являється модифікованим аналогом вже ставшого класичним методу Mean-Shift сегментації [10]. Цей підхід заключається у тому, що для кожного пікселя $x \in I$ зображення будується деяка функція густини (density function) $\hat{f}(x)$, що характеризує ступінь “скупчення” навколо точки x пікселів з близькими спектральними характеристиками. Далі для кожного пікселя x запускається ітераційна процедура пошуку найближчого локального максимуму функції $\hat{f}(\cdot)$, який (максимум) називатимемо модою $m(x)$ для пікселя x . Тоді сегментація зображення заключається у заміні кольору пікселя x кольором відповідної моди (етап фільтрації [10]) та подальшим об'єднанням подібних за спектральними характеристиками пікселів в класи (кластери). Додаткова обробка отриманих класів дозволяє значно зменшити їх кількість шляхом об'єднання (злиття) подібних суміжних класів та видаленням несуттєвих за розмірами кластерів [10].

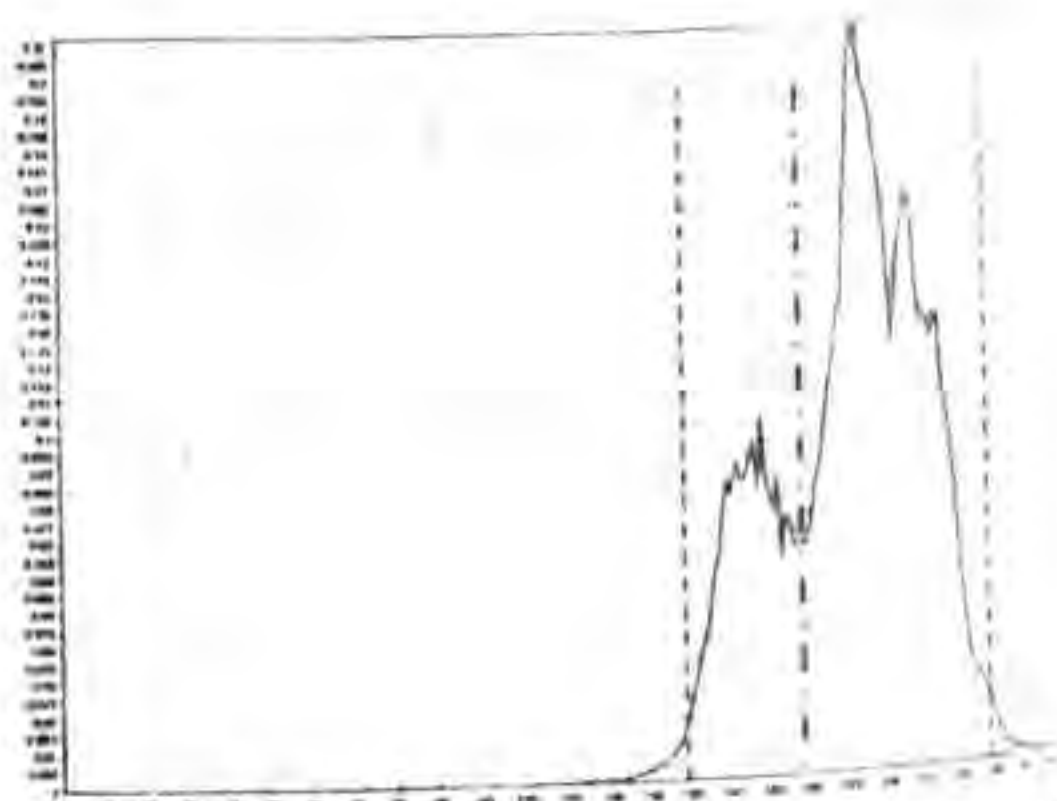
Нами пропонується алгоритмічна модифікація даного підходу, яка дозволяє суттєво зменшити час роботи алгоритму та кількість машинних ресурсів. Модифікація заключається в елімінації сітки, на якій обчислюється $\hat{f}(\cdot)$, а саме у визначенні для кожного пікселя x лише найближчого сусіднього пікселя з більшим значенням функції густини. Покривши всю сітку зображення I такими зв'язками, можна значно прискорити етап фільтрації за рахунок уникнення дублюючих обчислень. Результат сегментації аерознімку представлено на мал.16.



Мал.1. Зображення частини аерознімку і результат роботи алгоритму сегментації (вихідні дані публікуються з дозволу компанії Simmons AeroFilms, Англія, www.simmons-aerofilms.com).

Наступним кроком є побудова гістограми $Hist[\ell]$, $\ell = 1, \dots, N$ для відсегментованого зображення. Після аналізу різних кольорових просторів [1,11], ми дійшли висновку, що найбільш репрезентативним (з точки зору відділення затінених ділянок) є побудова гістограми по Hue-компоненті в HSI-просторі (hue-saturation-intensity: тон кольору, насиченість, контрастність – одна із моделей відображення кольору) [11]. Такий підхід показав кращі результати у порівнянні з [4,5], де гістограма будується у класичному RGB-просторі представлення кольорів. Отримана гістограма нормується (що $\|\sum_{\ell=1}^N Hist[\ell]\| = 1$), і для аерознімку, частина якого представлена на мал.1а, має вигляд (мал.2).

Задача обробки гістограм є важливою прикладною проблемою. Підходи до її розв'язання можна знайти, наприклад, в [1,11]. В даній статті пропонується використовувати для цього структурно-параметричний підхід [12,13]. Щоб знайти шуканий поріг (на мал.2 він відповідає вертикальній штрих-пунктирній лінії) будемо апроксимувати значиму частину гістограми (на мал.2 значима частина лежить між двома штриховими лініями) двома параболою так, щоб відхилення точок гістограми від цих парабол було мінімальним. Параболи задаватимемо у параметричному вигляді, їх структуру представлено на мал.3.



Мал.2. Гістограма, побудована для hue-компоненти відсегментованого зображення.

Якщо a_{i-1}, a_i ($i=1,2$) – точки перетину i -ї парабол з віссю OX , а ω_i ($i=1,2$) – максимальна ордината відповідної параболі, то параметричне рівняння такої параболі на проміжку $x \in [a_{i-1}; a_i]$ має вигляд:

$$y \equiv A(a_{i-1}, a_i, \omega_i, x) = -\frac{4\omega_i}{(a_i - a_{i-1})^2} \left(x - \frac{a_{i-1} + a_i}{2} \right)^2 + \omega_i, \quad i=1,2. \quad (1)$$

Введемо критерій якості у вигляді

$$I = \sum_{i=1}^2 \sum_{\ell=\text{int}(a_{i-1})}^{\text{int}(a_i)} (Hist[\ell] - A(a_{i-1}, a_i, \omega_i, \ell))^2 \rightarrow \min_{a_0, a_1, a_2, \omega_1, \omega_2}, \quad (2)$$

де $\text{int}(z)$ – ціла частина від z .

Очевидно, що при фіксованих a_i ($i=0, \dots, 2$) задачу (2) можна розбити на дві незалежні підзадачі мінімізації відповідно по ω_i , $i=1,2$.

Використовуючи підхід, аналогічний до широко відомого методу найменших квадратів, можна отримати оптимальне значення для ω_i , $i=1,2$ (при фіксованих значеннях a_i , $i=0, \dots, 2$):

$$\omega_i = (A_i^T A_i)^{-1} H_i^T A_i, \quad i=1,2, \quad (3)$$

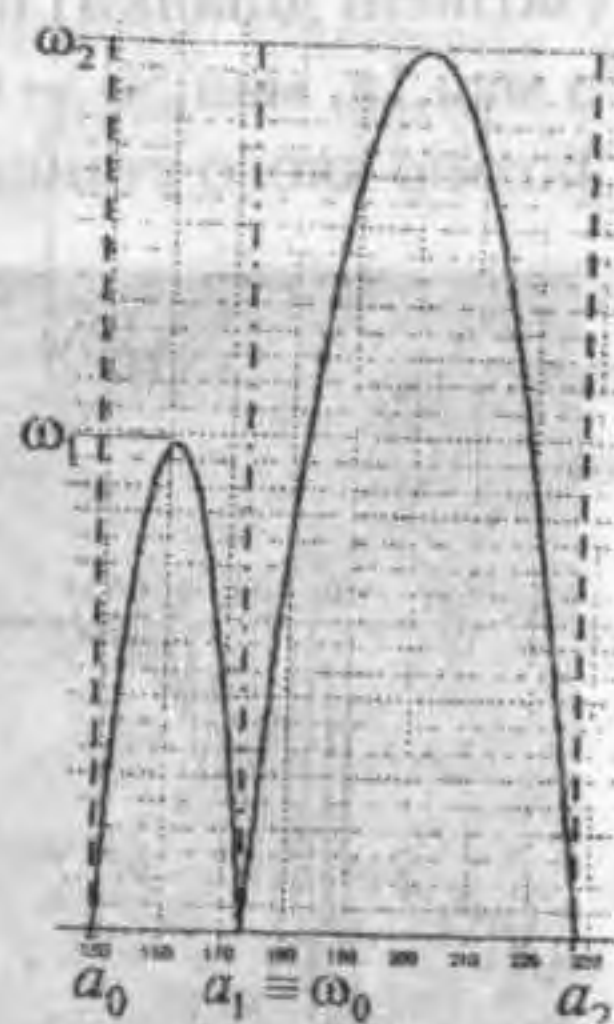
де $A_i = (A_{i1}, \dots, A_{iN_i})^T$, $N_i = \text{int}(a_i) - \text{int}(a_{i-1}) + 1$; $A_{i\ell} = A(a_{i-1}, a_i, \omega_i, x)|_{x=\text{int}(a_{i-1})+\ell-1}$, $\ell=1, \dots, N_i$, $i=1,2$; $H_i = (H_{i1}, \dots, H_{iN_i})^T$, $H_{i\ell} = Hist[\text{int}(a_{i-1}) + \ell - 1]$, $\ell=1, \dots, N_i$, $i=1,2$.

Шляхом обмеженого направленного перебору по дискретному параметру $\omega_0 \equiv a_1$ (при фіксованих a_0 та a_2), знаходимо відповідні оптимальні значення ω_i^{opt} , $i=0, \dots, 2$. Для гістограми з мал.2 результат такої структурно-параметричної оптимізації приведено на мал.4.

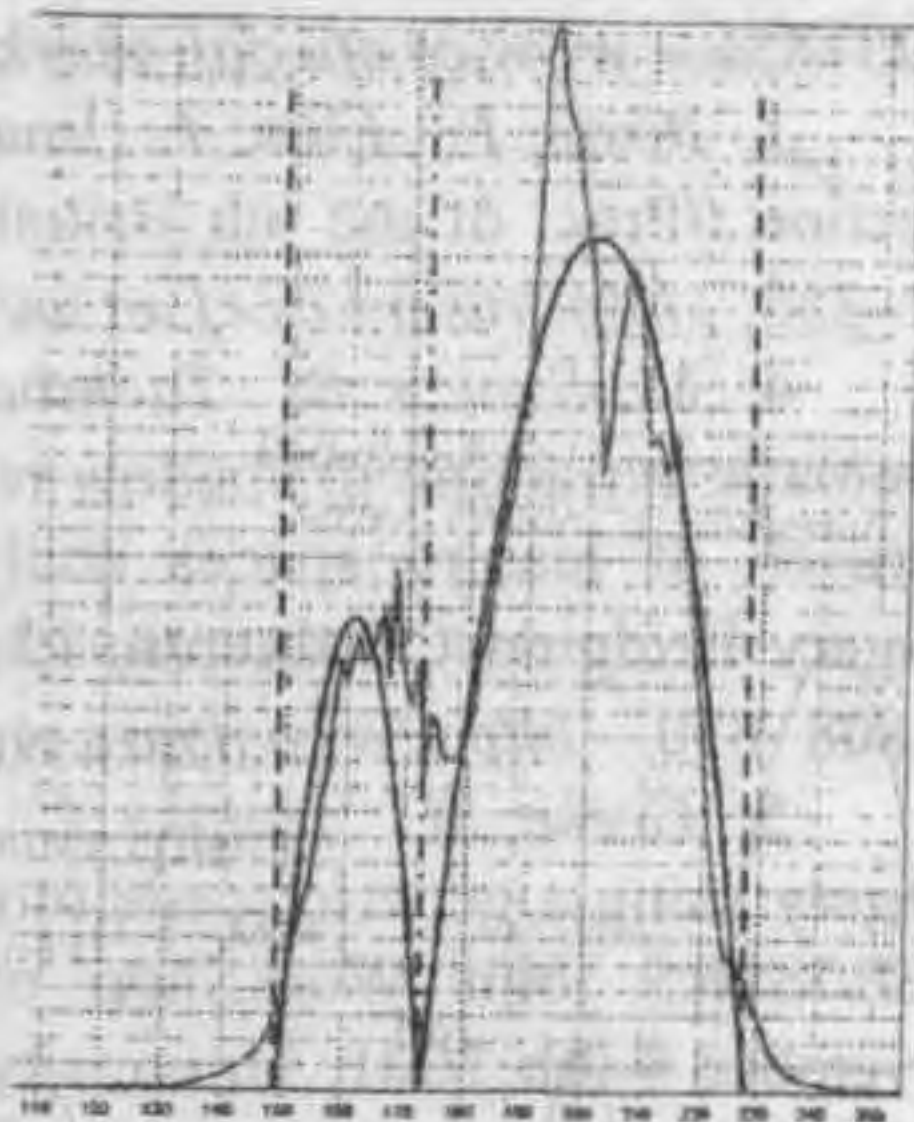
На основі знайденого порогу $Threshold = \omega_0^{opt}$ проводимо далі порогове відділення сегментованого зображення:

$$I^{Threshold}(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } I(x) < Threshold \\ 255, & \text{якщо } I(x) \geq Threshold. \end{cases}$$

Результат порогового відділення

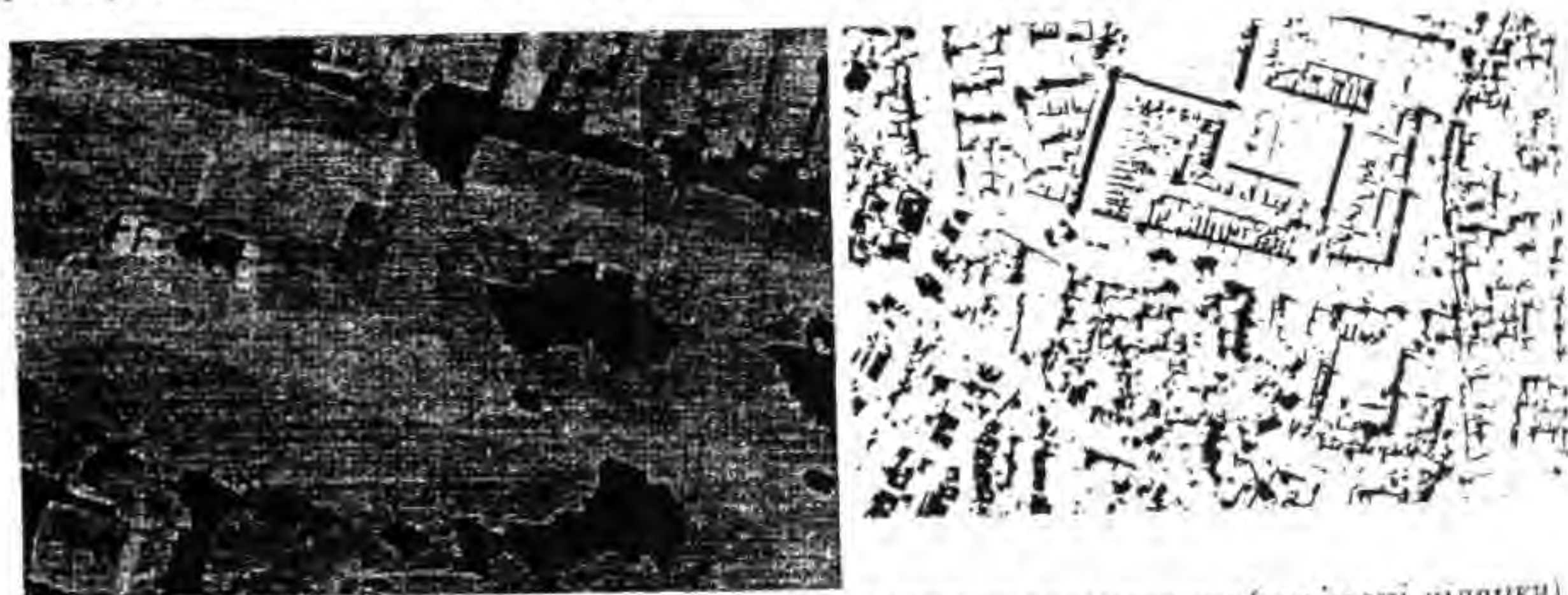


Мал.3. Структура парабол.



Мал.4. Оптимальна структура парабол, якими апроксимується гістограма з мал.2.

(затінені ділянки) представлено на мал.5 (мал.5а – тіні для частини зображення з мал.1а, мал.5б – бітональна маска для більшої частини аерознімку, загальний розмір якого становить у даному випадку 5000×5000 пікселів).



Мал.5. Результат роботи запропонованого алгоритму (затінені ділянки) для різних частин вхідного аерознімку.

В подальших дослідженнях з даної тематики авторами планується розвинути структурно-параметричну апроксимацію гістограм на випадок гармонічних базисних функцій [13].

Література

1. Acharya T., Ray A. Image processing: principles and applications. – New Jersey: Willey-Interscience Publication, 2005. – 428p.
2. Finlayson G., Hordley S., Drew M. Removing shadows from images //Proc. of the European Conference on Computer Vision (ECCV-2002), 2002. – PP. 4:823–836. – www.cs.sfu.ca/~mark/ftp/Eccv02/shadowless.pdf.
3. Rosin P., Ellis T. Image difference threshold strategies and shadow detection //Proc. of the 6th British Machine Vision Conf., Birmingham, 1995. – PP. 347–356. – <http://users.cs.cf.ac.uk/Paul.Rosin/resources/papers/shadows.pdf>.
4. Madhavan B., Tachibana K., Sasagawa T., Okada H., Shimozuma Y. Automatic extraction of shadow regions in high-resolution ADS40 images – by robust approach of feature spaces analysis //Proc. of the XXth ISPRS Congress Geo-Imagery Bridging Continents, 12–23 July 2004, Istanbul, Turkey, Commission 3. PP.808–810. – <http://www.isprs.org/istanbul2004/comm3/papers/379.pdf>.
5. Gerke M., Heipke C., Straub B.-M. Building extraction from aerial imagery using a generic scene model and invariant geometric moments //Proc. of the IEEE/ISPRS joint WorkShop on Remote and Data Fusion over Urban Areas. November 8–9th 2001, University of Pavia, Rome (Italy), ISBN 0–7803–7059–7. PP.85–89.
6. Holland D.A., Tompkinson W. Improving the update of geospatial information databases from imagery using semi-automated user-guidance techniques

//Proc. of the 7th International Conference on GeoComputation University of Southampton, United Kingdom, 8–10 September 2003.– PP.1–12.– http://www.geocomputation.org/2003/Papers/Holland_Paper.pdf.

7. Nakajima T., Tao Guo, Yasuoka Y. Simulated recovery of information in shadow areas on IKONOS image by combing ALS data //Proc. of the 23rd Asian Conference on Remote Sensing (ACRS–2002), Kathmandu, Nepal, 25–29 November 2002,– PP.1–7.– www.gisdevelopment.net/aars/acrs/2002/vhr/214.pdf.

8. Lucchese L., Mitra S. Color image segmentation: A state-of-the-art survey //Proc. of the Indian National Science Academy (INSA-A).– 2001.– 67 (2).– PP.207–221.– http://web.engr.oregonstate.edu/~luca/proc_insa_01.pdf.

9. Верченко А.П., Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Рекуррентные средства кластеризации в применении к задачам сегментации изображений //Проблемы управления и информатики, 2005, №2, С.62–71.

10. Comaniciu D., Meer P. Mean shift: a robust approach toward feature space analysis // IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell.– May 2002.– 24.– P.603–619.

11. Crane R. A simplified approach to image processing: classical and modern techniques in C.– New Jersey: Prentice Hall PTR. Upper Saddle River, 07458. 1997.– 317p.

12. Бублик Б.Н., Гаращенко Ф.Г., Кириченко Н.Ф. Структурно-параметрическая оптимизация и устойчивость динамики пучков.– К.: Наук. думка. 1985.– 304с.

13. Швець О.Ф. Використання методу структурно-параметричної оптимізації в задачах цифрової обробки інформації // Вісник КУ. Серія фіз.-мат. науки.– 2005.– Вип.4.

Надійшла до редакції 21.03.2006

УДК 532.72:532.546:519.63

Анатолій П. Власюк¹, Ольга М.
Степанченко²

Чисельне розв'язування однієї нелінійної задачі розчинення пласта солі

Побудовано математичну модель задачі дифузійного розчинення сольового пласта, перекритого зверху шаром ґрунту скінченної товщини, в рамках задачі типу Стефана. Розроблено обчислювальний алгоритм розв'язок відповідної крайової задачі. Чисельний розв'язок отримано методом скінченних різниць. На основі проведених числових експериментів виявлено залежність товщини зони повного розчинення пласта від часу та товщини дифузійного приміжжєвого шару.

Ключові слова: моделювання, розчинення, дифузія, математична модель, різницева схема, обчислювальний алгоритм.

Anatoliy P. Vlasyuk¹, Olga M.
Stepanchenko²

Numerical solution of one non- linear problem of salt seam dissolution

The article develops mathematical model of a problem of a salt seam diffusive dissolution, which is blocked above by ground layer of final thickness. The mathematical model was considered within the framework of Stephan's type task. There was developed the computing algorithm of this boundary value problem. The numerical solution was obtained by a method of final differences. On the basis of the carried out numerical experiments there was found the dependence of thickness of full dissolution seam zone on time and thickness diffusive frontier layer.

Key Words: modeling, dissolution, diffusion, mathematical model, difference scheme, numerical algorithm.

E-mail: A.P.Vlasyuk@rdtu.rv.ua

1. Вступ.

В сучасних умовах значна кількість гідротехнічних, енергетичних та ін. об'єктів експлуатується в умовах підвищеного техногенного ризику, які в силу обставин побудовані і експлуатуються в несприятливих гідрогеологічних умовах – залягання під ними водорозчинних порід, закарстованості ґрунтів, тектонічних розломів та ін. В процесі експлуатації цих споруд, внаслідок протікання різних фізико-хімічних процесів (дифузійного розчинення, фільтрації підземних вод, масопереносу та ін.) відбувається розчинення підземних водорозчинних порід в основах вищевказаних об'єктів. В зв'язку з цим набуває актуальності задача прогнозу розвивання зон повного розчинення та утворення каверн в основах даних споруд, що впливає на оцінку їх стійкості та надійності.

2. Постановка задачі.

В даній статті розглянемо один з найпростіших випадків розчинення необмеженого монолітного водорозчинного пласта солі, перекритого зверху шаром ґрунту скінченної товщини l_0 (рис. 1).

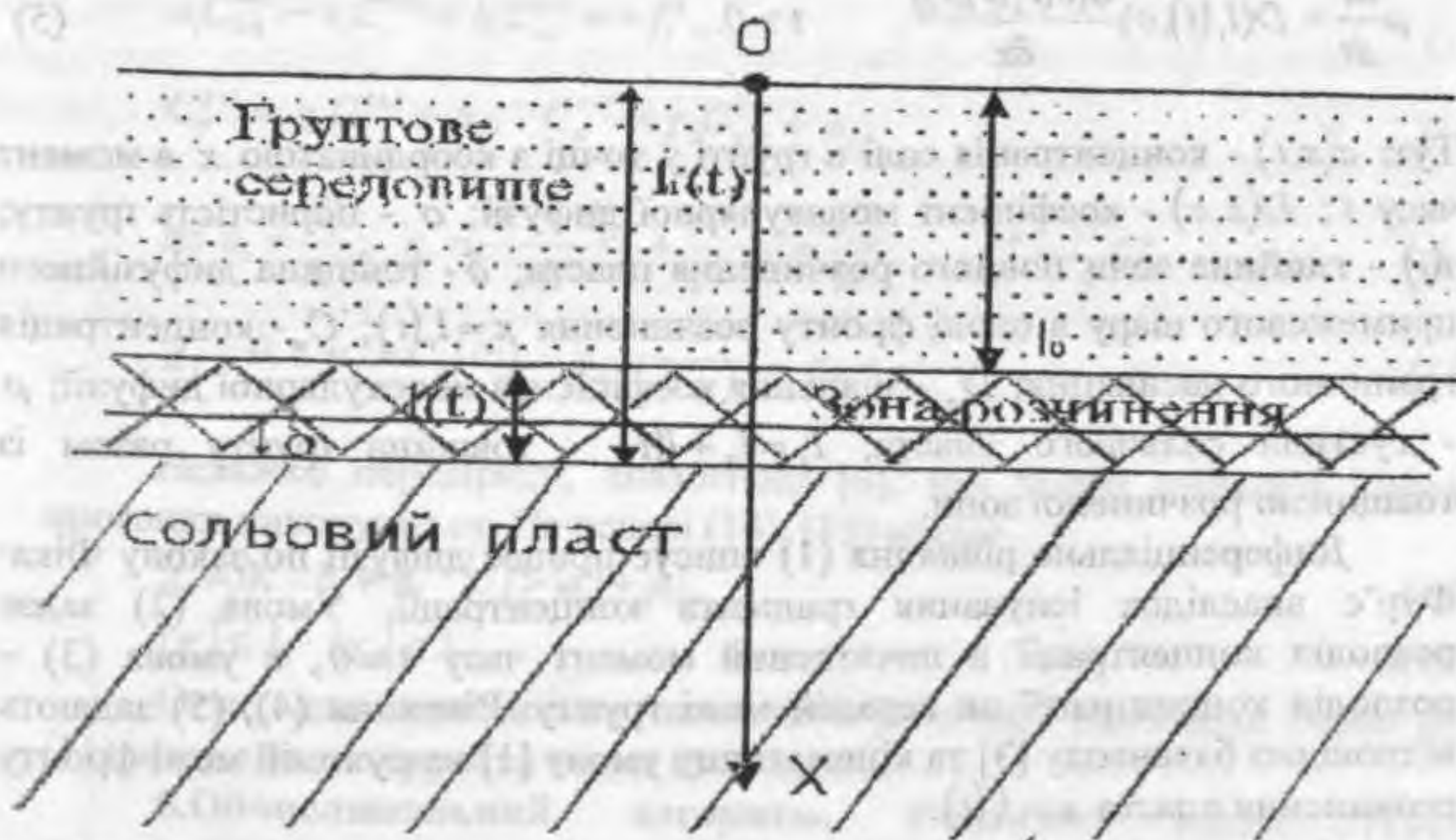


Рис. 1

Будемо вважати, що процес розчинення відбувається під впливом молекулярної дифузії за рахунок зміни градієнту концентрації солей. Припустимо, що в момент часу $t=0$ верхній шар ґрунту товщиною l_0 наситився ґрунтовими водами з початковою концентрацією солі $C_0(x)$, яка менша концентрації граничного насичення C_* ($C_0(x) < C_*$). В результаті процесу розчинення пласта солі виникає і розвивається з часом зона повного розчинення сольового пласта товщиною $l(t)$, в якій солі повністю перейшли в розчинений стан.

В зв'язку з цим потрібно розрахувати розподіл концентрації солі в ґрунті протягом певного проміжку часу і еволюцію зони повного розчинення.

3. Математична модель задачі. Виберемо початок координат на поверхні ґрунту і направимо вісь OX вниз. Тоді математична модель процесу дифузійного розчинення пласта солі на основі [1,2] прийме наступний вигляд:

$$\frac{\partial \left(D(x, c) \frac{\partial c}{\partial x} \right)}{\partial x} = \sigma \frac{\partial c}{\partial t}, \quad x \in (0, l_1) \quad t > 0 \quad (1)$$

$$c(x, 0) = C_0(x), \quad x \in [0, l_0] \quad (2)$$

$$c(0, t) = C_1(t), \quad t > 0, \quad (3)$$

$$\sigma \frac{\partial c(l_1(t), t)}{\partial x} + c = C_*, \quad t > 0, \quad (4)$$

$$\rho \frac{dl}{dt} = D(l, t, c) \frac{\partial(c(l, t, t))}{\partial x}, \quad t > 0. \quad (5)$$

Тут: $c(x, t)$ - концентрація солі в ґрунті у точці з координатою x в момент часу t ; $D(x, c)$ - коефіцієнт молекулярної дифузії; σ - пористість ґрунту; $l(t)$ - глибина зони повного розчинення пласта; δ - товщина дифузійного примежевого шару в околі фронту розчинення $x = l(t)$; C_m - концентрація граничного насичення; D_m - значення коефіцієнта молекулярної дифузії; ρ - густина сольового пласта; $l_1 = l_0 + l(t)$ - товщина ґрунту разом із товщиною розчиненої зони.

Диференціальне рівняння (1) описує процес дифузії по закону Фіка-Фур'є внаслідок існування градієнта концентрації. Умова (2) задає розподіл концентрації в початковий момент часу $t = 0$, а умова (3) - розподіл концентрації на верхній межі ґрунту. Рівняння (4), (5) задають відповідно балансову [3] та кінематичну умову [1] на рухомій межі фронту розчинення пласта $x = l_1(t)$.

Неважко показати [4,5], що при певних вимогах на коефіцієнти рівняння (1) та крайові умови (4)-(5) задача (1)-(5) коректно поставлена.

4. Різницєва схема задачі. Запишемо неявну різницєву схему крайової задачі (1)-(5) типу Стефана. Вона матиме наступний вигляд:

$$\frac{l}{h} \left(d_{i+1}^k \frac{C_{i+1}^{k+1} - C_i^{k+1}}{h} - d_i^k \frac{C_i^{k+1} - C_{i-1}^{k+1}}{h} \right) = \sigma \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\tau}, \quad (6)$$

$$C_i^0 = C_0(ih), \quad i = \overline{0, n}, \quad (7)$$

$$C_0^{k+1} = C_1^{k+1}, \quad k = 0, 1, \dots, K-1, \quad (8)$$

$$\delta \frac{C_n^{k+1} - C_{n-1}^{k+1}}{h} + C_n^{k+1} = C_m, \quad (\text{при } \delta = 0 \text{ маємо } C_n^{k+1} = C_m), \quad (9)$$

$$\text{де } d_i^k = \frac{D(C_i^k) + D(C_{i-1}^k)}{2}, \quad h \text{ і } \tau - \text{кроки відповідно по осях } Ox \text{ і } Ot.$$

Рівняння руху межі (5) апроксимуємо наступним чином:

$$\rho \frac{l_i^{k+1} - l_i^k}{\tau} = D(C_n^{k+1}) \frac{C_n^{k+1} - C_{n-1}^{k+1}}{h}. \quad (10)$$

Звідки маємо

$$l_i^{k+1} = l_i^k + \frac{\tau D(C_n^{k+1})}{\rho h} (C_n^{k+1} - C_{n-1}^{k+1}). \quad (11)$$

Неважко показати, що дана різницєва схема стійка з порядком апроксимації $O(h^2 + \tau)$ [6].

Розв'язок даної схеми отримаємо методом прогонки. В зв'язку з цим запишемо різницєву схему в розгорнутому прогоночному вигляді:

$$a_i C_{i-1}^{k+1} - c_i C_i^{k+1} + b_i C_{i+1}^{k+1} = -f_i^k, \quad (12)$$

$$C_0^{k+1} = \chi_1 C_1^{k+1} + \mu_1, \quad C_n^{k+1} = \chi_2 C_{n-1}^{k+1} + \mu_2, \quad (13)$$

$$\text{де } a_i = \frac{d_i^k}{h^2}; \quad c_i = \frac{d_i^k + d_{i+1}^k}{h^2} + \frac{\sigma}{\tau}; \quad b_i = \frac{d_{i+1}^k}{h^2}; \quad f_i^k = \frac{\sigma}{\tau} C_i^k, \quad (14)$$

$$\chi_1 = 0, \quad \mu_1 = C_0(ih), \quad \chi_2 = \frac{\delta}{\delta + h}, \quad \mu_2 = \frac{h}{\delta + h} C_n. \quad (15)$$

Неважко перевірити, аналогічно [6], що умови стійкості методу прогонки виконуються. На основі (14), (15) маємо

$$a_i \neq 0, \quad b_i \neq 0, \quad |c_i| > |a_i| + |b_i|, \quad (16)$$

$$|\chi_1| \leq 1, \quad |\chi_2| < 1. \quad (17)$$

Отже, для знаходження чисельного розв'язку різницевої схеми (6)-(11) можна застосовувати метод прогонки.

5. Обчислювальний алгоритм. Розв'язок задачі (1)-(5) ускладнюється тим, що вона має вільну рухому межу, на якій задається статична умова (4) та кінематична умова (5), яка визначає закон її руху. Тому, для побудови чисельного розв'язку різницевої схеми (6)-(11) при розрахунку концентрації розчинених речовин на кожному часовому шарі потрібно враховувати зсув межі фронту розчинення сольового пласта.

Наведемо словесний опис алгоритму знаходження чисельного розв'язку різницевої схеми (6)-(11). На кроці $k=0$ ($t=0$) використовуючи (7) знаходимо розподіл концентрації в шарі ґрунту по області $x \in (0, l_0)$.

Розраховуємо розподіл концентрації C_i^1 , $i = \overline{0, n}$ на першому часовому шарі. Після чого заходимо зсув межі фронту розчинення

$$l^1 = l_0 + \frac{\tau D(C_n^1)}{\rho h} (C_n^1 - C_{n-1}^1).$$

Розраховуємо розподіл концентрації C_i^2 , $i = \overline{0, n}$ на другому часовому шарі з врахуванням зсуву межі фронту розчинення $[0, l^1]$. Знаходимо нове зміщення межі

$$l^2 = l^1 + \frac{\tau D(C_n^2)}{\rho h} (C_n^2 - C_{n-1}^2),$$

і т.д.

Варто зазначити, що на кожному часовому шарі необхідно також проводити корекцію кроку h .

6. Результати числових експериментів. Програмна реалізація даного алгоритму здійснена в середовищі Borland C++ Builder 6.0. Розроблена програма працює з користувачем в діалоговому режимі. В ній

реалізовано: діалоговий режим задання граничних та початкових умов, динамічне задання товщини примежевого дифузійного шару. Значна увага приділена графічному представленню результатів. Зокрема, розроблено можливість реверсивної побудови графіків, накладання декількох графіків, та зручне перенесення графіків і табличних результатів в текстові та графічні редактори.

Програму тестовано на модельному прикладі з [7].

Числові розрахунки для розмірених величин проведено при таких вихідних даних:

$$C_i(t) = 0, \quad C_m = 350 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad \rho = 2,2 \cdot 10^3 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \quad l_0 = 10 \text{ м},$$

$$h = 0,1 \text{ м}, \quad \sigma = 0,4, \quad D_m = 10^{-3} \frac{\text{м}^2}{\text{доб}}, \quad \tau = 30 \text{ діб},$$

$$C_0(x) = \frac{C_m - C_0}{l_0^2} x^2 + C_0.$$

Чисельно досліджувалися різні випадки нелінійності для коефіцієнта дифузії, а саме

$$D(x, c) = D_m + \alpha c, \quad D(x, c) = D_m e^{(-\alpha c)} \text{ та інші.}$$

Для більш наглядного представлення результати числових експериментів наведені нижче у вигляді графіків для наступного коефіцієнта дифузії $D(x, c) = D_m + \alpha c$.

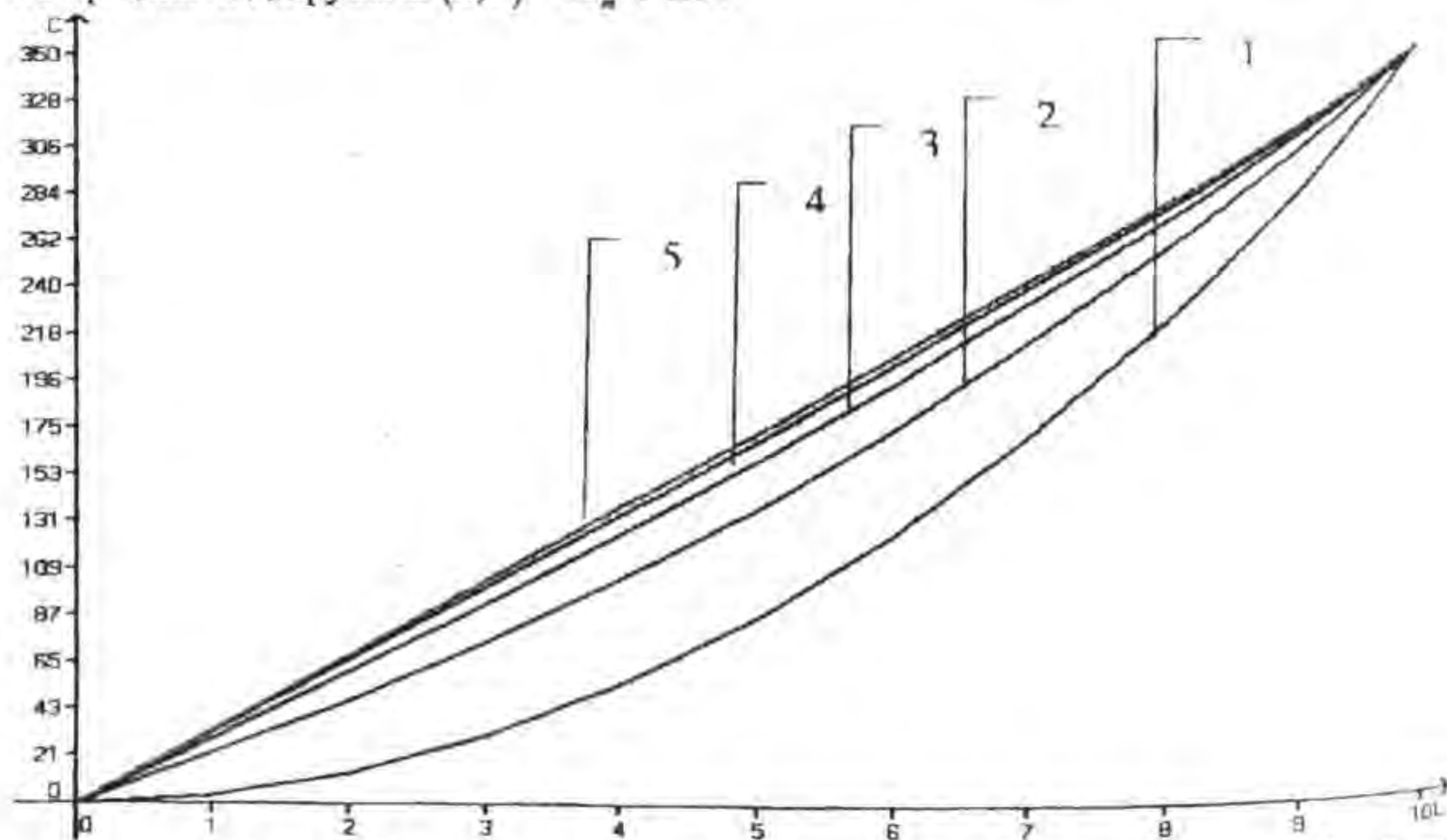


Рис 2. Графіки розподілу концентрації солі в ґрунті при $\delta = 0$ та $\alpha = 10^{-7}$, через 50 років.

(1), (2), (3), (4), (5) – графіки розподілу концентрації відповідно при $t = 0$, $t = 10$, $t = 20$, $t = 30$, $t = 40$, $t = 50$ (років).

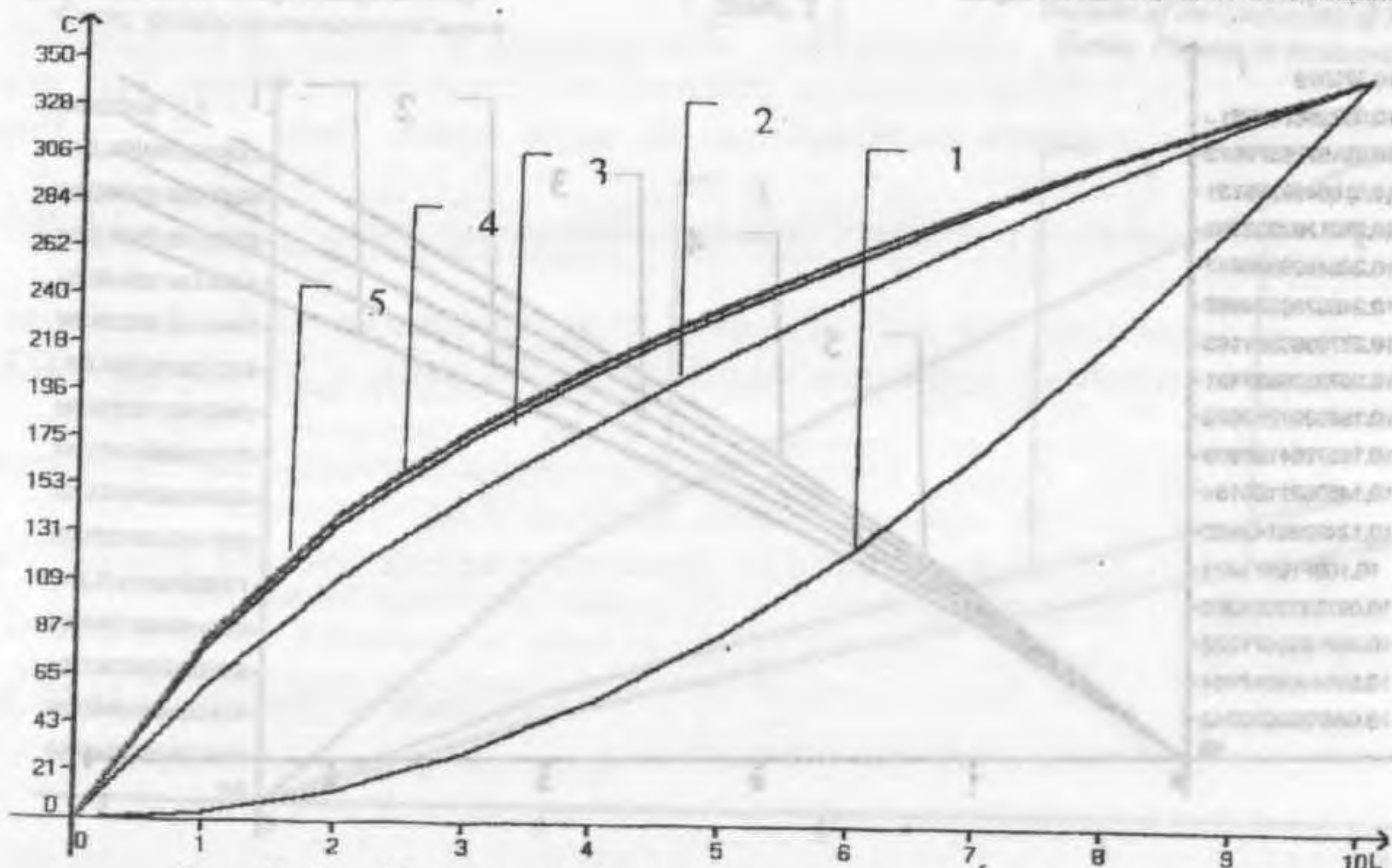


Рис 3. Графіки розподілу концентрації солі в ґрунті при $\delta = 0$ та $\alpha = 10^{-5}$, через 50 років.

(1), (2), (3), (4), (5) – графіки розподілу концентрації відповідно при $t = 0$, $t = 10$, $t = 20$, $t = 30$, $t = 40$, $t = 50$ (років).

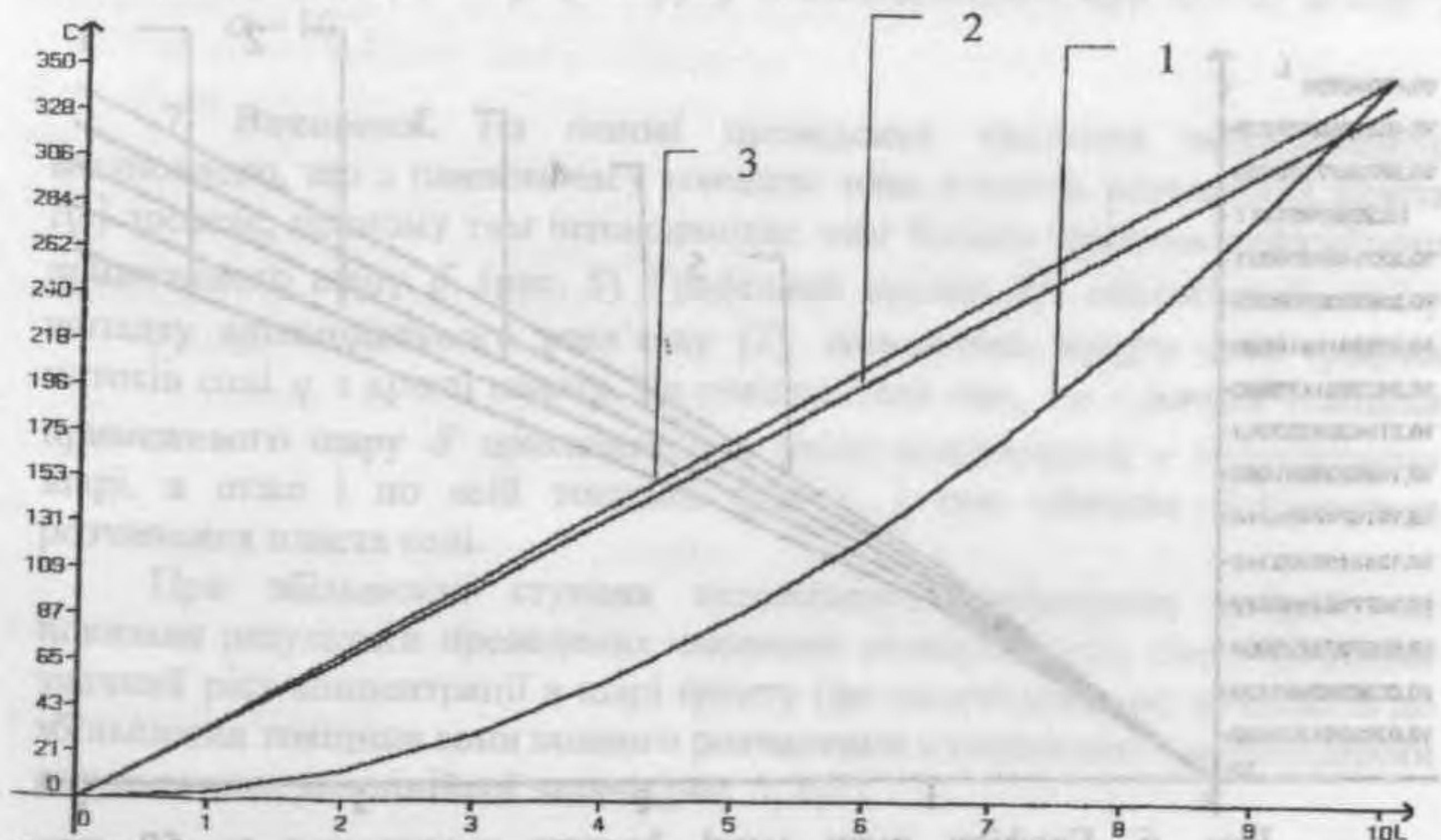


Рис. 4. Графіки розподілу концентрацій при різних значення δ та $\alpha = 10^{-7}$.

(1) – графік розподілу концентрації при $t = 0$ років.

(2) – графік розподілу концентрації при $t = 50$ років і $\delta = 0,4$ м.

(3) – графік розподілу концентрації при $t = 50$ років і $\delta = 0$ м.

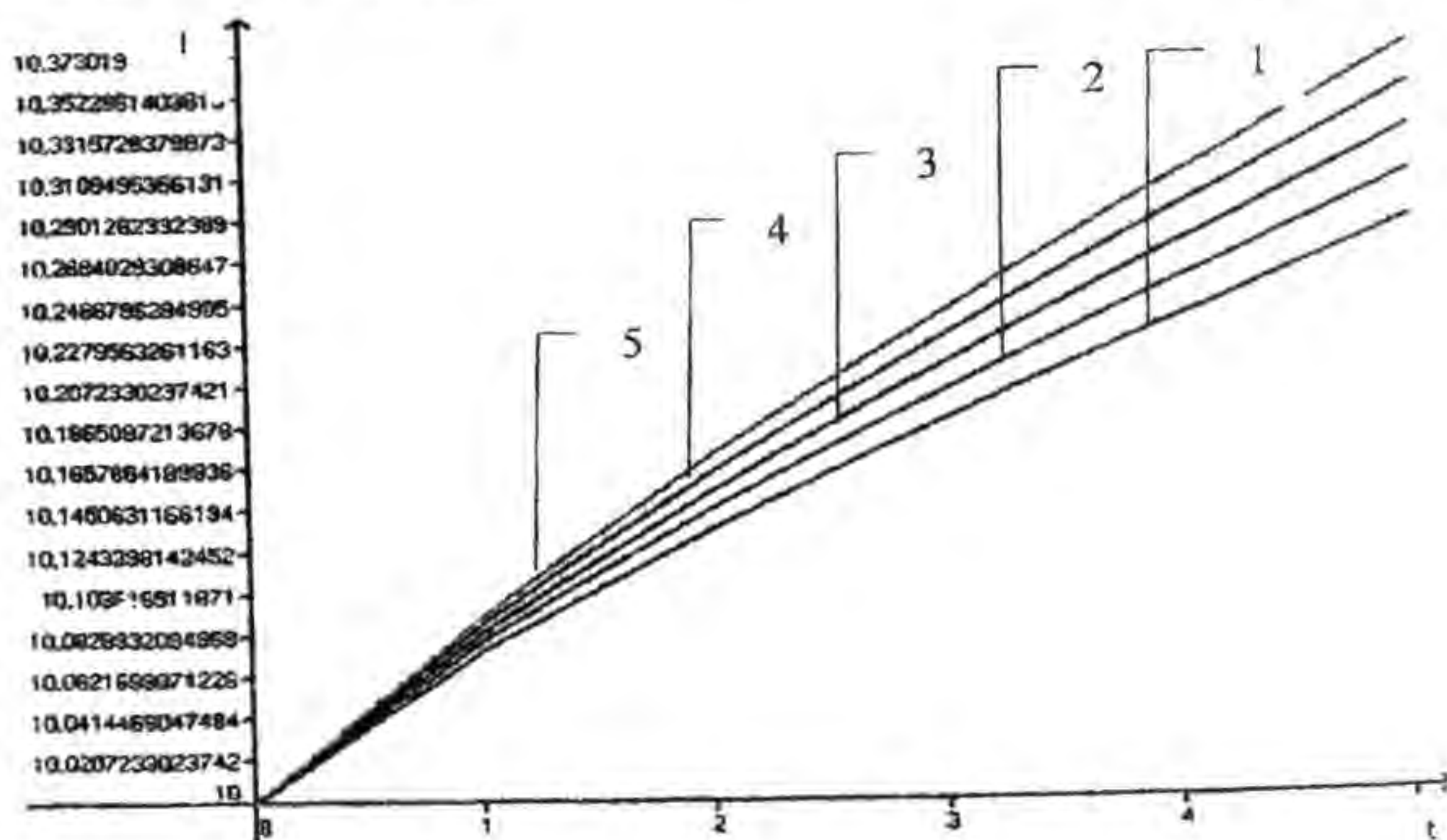


Рис. 5. Графіки руху межі фронту розчинення при $\alpha = 0$ за 50 років.

(1), (2), (3), (4), (5) – графіки руху межі відповідно при $\delta = 0$, $\delta = 0,1$, $\delta = 0,2$, $\delta = 0,3$ і $\delta = 0,4$ м.

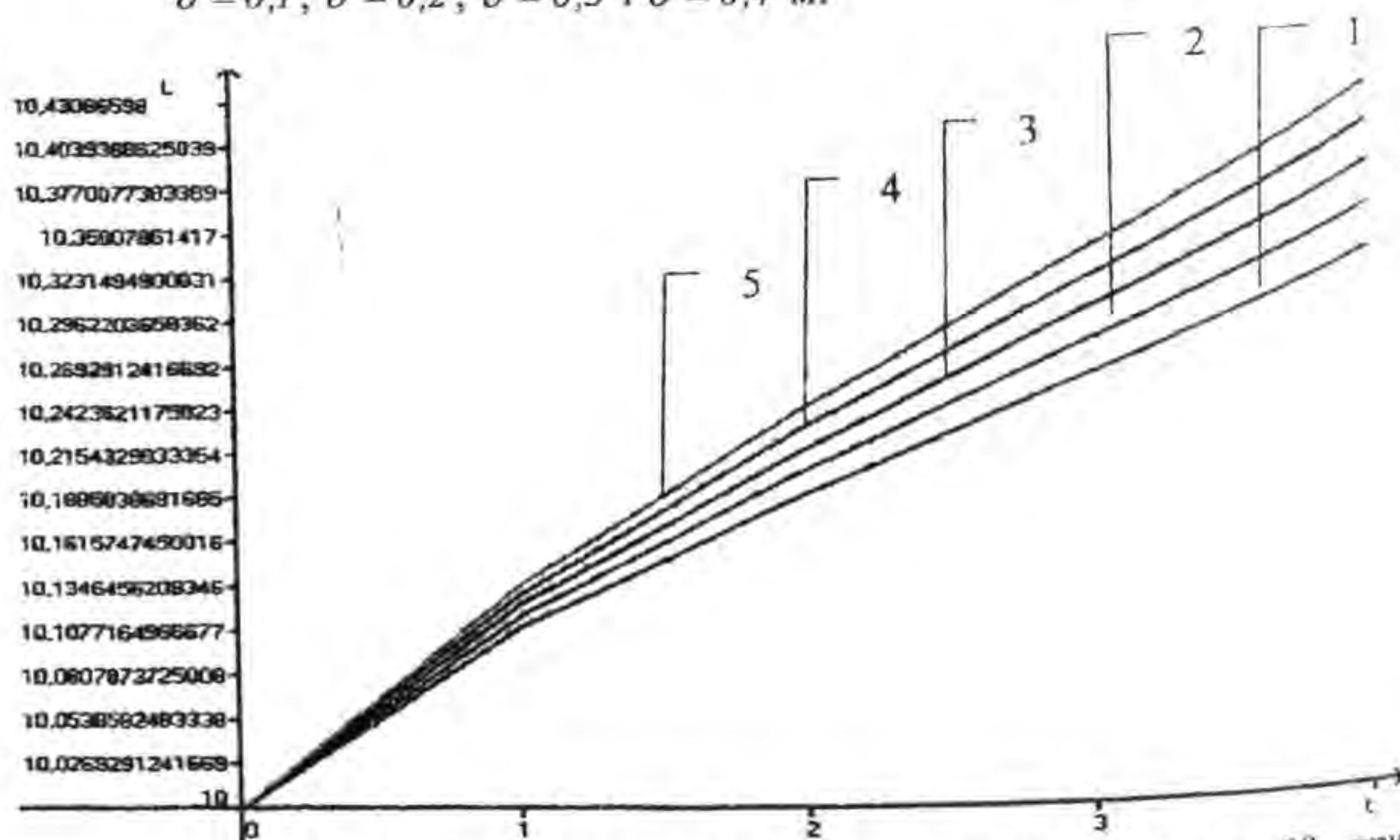


Рис. 6. Графіки руху межі фронту розчинення за 50 при $\alpha = 10^{-6}$ років.

(1), (2), (3), (4), (5) – графіки руху межі відповідно при $\delta = 0$, $\delta = 0,1$, $\delta = 0,2$, $\delta = 0,3$ і $\delta = 0,4$ м.

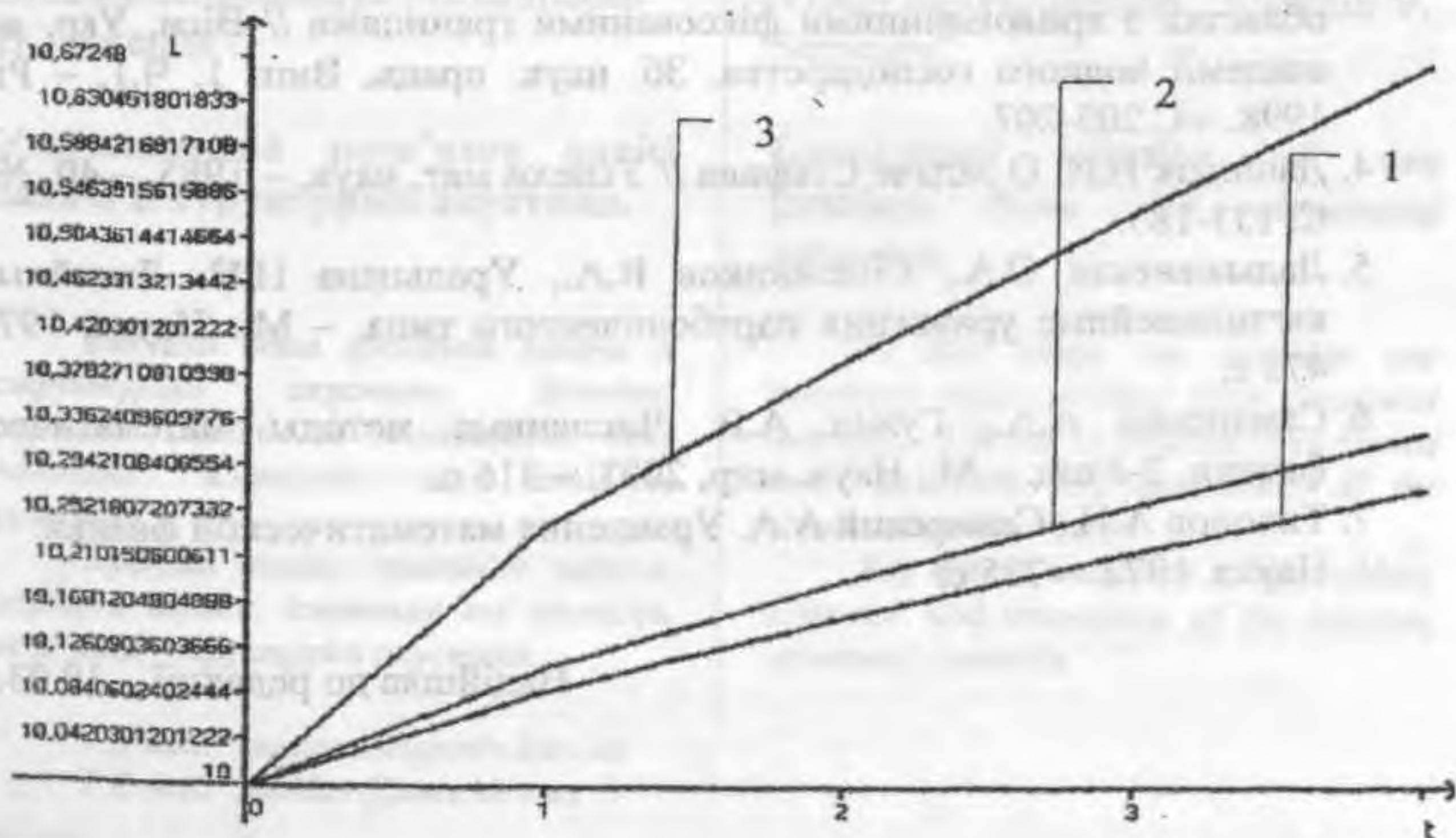


Рис. 7. Графіки руху межі фронту розчинення при $\delta = 0$ за 50 років.

(1), (2), (3) – графіки руху межі відповідно при $\alpha = 0$, $\alpha = 10^{-6}$, $\alpha = 10^{-5}$.

7. Висновки. На основі проведених числових експериментів встановлено, що з плином часу товщина зони повного розчинення пласта $l(t)$ зростає, причому тим інтенсивніше, чим більша товщина дифузійного примежевого шару δ (рис. 5). Графічний вигляд $l(t)$ аналогічний, як і у випадку автомобельного розв'язку [2]. Аналогічно ведуть себе графіки потоків солі q з кривлі пласта. Це пояснюється тим, що з ростом товщини примежевого шару δ прискорюється зміна концентрації в примежевому шарі, а отже і по всій товщині ґрунту, і тим швидше відбувається розчинення пласта солі.

При збільшенні ступеня нелінійності коефіцієнта дифузії, як показали результати проведених числових експериментів, спостерігається значний ріст концентрації в шарі ґрунту (до насичення), що приводить до збільшення товщини зони повного розчинення в порівнянні з відповідними результатами для лінійної задачі (рис. 5, 6, 7).

1. Веригин Н.Н. Диффузия у поверхности твёрдого тела, находящегося в жидкости // Журн. физ. химии. – 1958. – 32, №9. – С. 2097 – 2106.
2. Власюк А.П. Об одной задаче растворения пласта горной породы. // Рукопись деп. В ГНТБ Украины 15.12.93, №2441 Ук93. – 14 с.

3. Власюк А.П. Математичне моделювання процесів масопереносу в областях з криволінійними фіксованими границями // Вісн. Укр. держ. академії водного господарства. Зб. наук. праць. Вип. 1. Ч.1. – Рівне, 1998. – С.203-207.
4. Данилюк И.И. О задаче Стефана // Успехи мат. наук. – 1985. – 40, №5. – С. 133-185.
5. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уральцева И.Н. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. – М.: Наука, 1973. – 473 с.
6. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики. 2-е изд. – М.: Науч. мир, 2003. – 316 с.
7. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972. – 735 с.

Надійшла до редакції 10.03.06

Віталій М. Волощук¹, Володимир
В. Семенов².

Vitaliy M. Voloshchuk¹, Vladimir V.
Semenov²

**Узагальнений розв'язок однієї
задачі зі структурної акустики.**

**Generalized solution of one
problem from the structural
acoustics.**

Вивчена одна гранична задача зі
структурної акустики. Доведені
апріорні оцінки за допомогою яких
показано існування та єдиність
розв'язку.

In this paper we consider one
boundary value problem from Structural
Acoustics. A priori inequalities were proved
here. Existence and uniqueness of the
solution was also shown.

Ключові слова: гранична задача,
апріорні оцінки, існування та єдиність
розв'язку, структурна акустика.

Key Words: boundary value problem,
existence and uniqueness of the solution,
structural acoustics.

1 E-mail: randomice@univ.kiev.ua

2 E-mail: snakkar@univ.kiev.ua

В даній роботі досліджується питання існування та єдиності
узагальненого розв'язку початково-крайової задачі для системи
диференціальних рівнянь в частинних похідних, що описує вплив коливань
гнучкої стінки камери на поширення акустичних коливань у цій камері. Ця
задача вивчалася в [3], та була також проаналізована в [1].

Фізична модель описує поведінку сурдокамери з гнучкою стінкою.
Керування системою здійснюється через прикладання зусиль до цієї
гнучкої стінки, і клас розглянутих керувань представляє собою керування,
що генеруються зсувом п'єзокерамічних частинок стінки. Функції, що
описують керування системи належать до класу узагальнених функцій
скінченного порядку (імпульсні та точкові впливи, тощо).

Нехай маємо обмежену область $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ з межею Γ , причому
 $\Gamma_0 \subseteq \Gamma$. Введемо наступні позначення:

$$Q = (0, T) \times \Omega, \Sigma_0 = (0, T) \times \Gamma_0, \Sigma = (0, T) \times \Gamma.$$

Розглянемо граничну задачу: знайти вектор-функцію $\varphi = (z, v)$
($z = z(t, x)$, де $t \in [0, T]$, $x \in \Omega$; $v = v(t, \xi)$, де $t \in [0, T]$, $\xi \in \Gamma_0$), що є
розв'язком системи:

$$\begin{cases} z_{tt} - \Delta z = f, \\ v_{tt} + \Delta^2 v + \Delta^2 v_t + z_t = g, \end{cases} \quad (0.1)$$
$$f \in L_2(Q), g \in L_2(\Sigma_0).$$

та задовольняє умови:

$$\frac{\partial z}{\partial \vec{n}} = \begin{cases} v_i, \xi \in \Sigma_0, \\ 0, \xi \in \Sigma \setminus \Sigma_0, \end{cases} \quad (0.2)$$

$$v|_{\partial\Gamma_0} = \frac{\partial v}{\partial \vec{n}}|_{\partial\Gamma_0} = 0, \quad (0.3)$$

$$z|_{t=0} = z_t|_{t=0} = v|_{t=0} = v_t|_{t=0} = 0, \quad (0.4)$$

де $\vec{n}$ – вектор зовнішньої нормалі, $\frac{\partial z}{\partial \vec{n}}$ – нормальна похідна по Γ , $\frac{\partial v}{\partial \vec{n}}$ – нормальна похідна по $\partial\Gamma_0$.

Оператор, який описує система (0.1) має вигляд:

$$L(\varphi) = \begin{pmatrix} z_n - \Delta z \\ v_n + \Delta^2 v + \Delta^2 v_t + z_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta & 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} & \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta^2 + \Delta^2 \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z \\ v \end{pmatrix}, \quad (0.5)$$

$$L: L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0) \rightarrow L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0). \quad (0.6)$$

Область визначення $D(L)$ складається з функцій що належать класу $C^2(Q) \times C^5(\Sigma_0)$, та задовольняють умови (0.2) - (0.4).

Формально спряжений до нього оператор має вигляд:

$$L^*(\psi) = \begin{pmatrix} y_n - \Delta y \\ w_n + \Delta^2 w - \Delta^2 w_t + y_t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta & 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} & \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta^2 - \Delta^2 \frac{\partial}{\partial t} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ w \end{pmatrix}, \quad (0.7)$$

$$L^*: L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0) \rightarrow L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0). \quad (0.8)$$

Область визначення $D(L^*)$ складається з функцій що належать класу $C^2(Q) \times C^5(\Sigma_0)$, та задовольняють умови:

$$\frac{\partial y}{\partial \vec{n}} = \begin{cases} w_i, \xi \in \Sigma_0, \\ 0, \xi \in \Sigma \setminus \Sigma_0, \end{cases} \quad (0.9)$$

$$w|_{\partial\Gamma_0} = \frac{\partial w}{\partial \vec{n}}|_{\partial\Gamma_0} = 0, \quad (0.10)$$

$$w|_{t=T} = w_t|_{t=T} = y|_{t=T} = y_t|_{t=T} = 0. \quad (0.11)$$

Введемо до розгляду наступні гільбертові простори: W та W_+ – поповнення множин $D(L)$ та $D(L^*)$ відповідно за нормою:

$$\|\varphi\|_W^2 = \int_Q \left(z_t^2 + \sum_{i=1}^n z_{x_i}^2 \right) dQ + \int_{\Sigma_0} \left(v_t^2 + \sum_{i=1}^n v_{x_i}^2 \right) d\Sigma_0. \quad (0.12)$$

Нехай, простори H та H_+ – поповнення $D(L)$ та $D(L^*)$, відповідно, по нормам:

$$\|(z, v)\|_H^2 = \int_Q z^2 dQ + \int_{\Omega} (z|_{t=T})^2 d\Omega + \int_{\Sigma_0} \left(v^2 + \sum_{i=1}^n v_{x_i}^2 \right) d\Sigma_0 + \int_{\Gamma_0} (v|_{t=T})^2 d\Gamma_0,$$

$$\|(z, v)\|_{H_+}^2 = \int_Q z^2 dQ + \int_{\Omega} (z|_{t=0})^2 d\Omega + \int_{\Sigma_0} \left(v^2 + \sum_{i=1}^n v_{x_i}^2 \right) d\Sigma_0 + \int_{\Gamma_0} (v|_{t=0})^2 d\Gamma_0.$$

Можна довести, що мають місце щільні та неперервні вкладення:

$$W \subseteq H \subseteq L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0) \subseteq H^- \subseteq W^-, \quad (0.13)$$

$$W_+ \subseteq H_+ \subseteq L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0) \subseteq H_+^- \subseteq W_+^-, \quad (0.14)$$

де негативні простори W^- та W_+^- побудовані відповідно по парам просторів $W, L_2(Q)$ та $W_+, L_2(Q)$.

Лема 1. Для всіх функцій $\varphi \in D(L)$, $\psi \in D(L^*)$ виконуються нерівності:

$$\|L\varphi\|_{W^-} \leq c \|\varphi\|_W, \quad \|L^*\psi\|_{W_+^-} \leq c \|\psi\|_{W_+}. \quad (0.15)$$

Доведення проводиться безпосереднім оцінюванням білінійної форми $(L\varphi, \psi)_{L_2(Q) \times L_2(\Sigma_0)}$, за допомогою нерівності Коші, використанням крайових умов, та інтегруванню по частинам.

Лема 2. Для всіх функцій $\varphi \in H$, $\psi \in H_+$ виконуються нерівності:

$$\|L\varphi\|_{W^-} \geq C \|\varphi\|_H, \quad \|L^*\psi\|_{W_+^-} \geq C \|\psi\|_{H_+}. \quad (0.16)$$

Доведення. Нехай $\varphi(x, t) = \begin{pmatrix} z(x, t) \\ v(x, t) \end{pmatrix}$ – гладка функція, що задовольняє умови (0.2), (0.3) та (0.4), тоді розглянемо таку функцію

$$\psi(x, t) = \begin{pmatrix} y(x, t) \\ w(x, t) \end{pmatrix}, \text{ що}$$

$$y(x, t) = - \int_t^T e^{-\sigma \tau} z(x, \tau) d\tau, \quad (0.17)$$

$$w(x, t) = - \int_0^t e^{-\alpha \tau} v(x, \tau) d\tau, \quad (0.18)$$

де α – деяка додатна константа, значення якої ми визначимо пізніше.

Очевидно, що:

$$z = -e^{\alpha t} y, \quad z_t = -e^{\alpha t} y_t - \alpha e^{\alpha t} y, \quad (0.19)$$

$$v = -e^{\alpha t} w, \quad v_t = -e^{\alpha t} w_t - \alpha e^{\alpha t} w. \quad (0.20)$$

Оцінимо скалярний добуток $(L\varphi, \psi)$:

$$\begin{aligned} (L\varphi, \psi) &= (L_1\varphi, y) + (L_2\psi, w) = \\ &= \int_Q (z_t - \Delta z) y dQ + \int_{\Sigma_0} (v_t + \Delta^2 v + \Delta^2 v_t + z_t) w d\Sigma_0 = \\ &= \int_Q z_t y dQ - \int_Q \Delta z y dQ + \int_{\Sigma_0} v_t w d\Sigma_0 + \\ &+ \int_{\Sigma_0} \Delta^2 v w d\Sigma_0 + \int_{\Sigma_0} \Delta^2 v_t w d\Sigma_0 + \int_{\Sigma_0} z_t w d\Sigma_0. \end{aligned} \quad (0.21)$$

Ми отримали суму шести інтегралів. Користуючись (0.19) отримаємо вираз для першого інтегралу:

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_Q z_t y dQ = - \int_Q z_t y_t dQ = \\ &= \int_Q (e^{\alpha t} y_t + \alpha e^{\alpha t} y) y_t dQ = \int_Q (e^{\alpha t} y_t y_t + \alpha e^{\alpha t} y_t^2) dQ. \end{aligned}$$

Застосуємо формули похідної від квадрату функції, та похідної добутку:

$$\begin{aligned} \int_Q (e^{\alpha t} y_t y_t + \alpha e^{\alpha t} y_t^2) dQ &= \int_Q \left(\frac{1}{2} e^{\alpha t} (y_t^2)_t + \alpha e^{\alpha t} y_t^2 \right) dQ = \\ &= \frac{1}{2} \int_Q (e^{\alpha t} y_t^2) \Big|_{t=0}^t dQ + \frac{1}{2} \int_Q \alpha e^{\alpha t} y_t^2 dQ = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} e^{\alpha T} y_t^2(x, T) d\Omega + \frac{1}{2} \int_Q \alpha e^{\alpha t} y_t^2 dQ. \end{aligned}$$

Аналогічно розглядаємо інтеграл I_2 :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_Q -\Delta z y dQ = - \int_Q \sum_{i=1}^n z_{,i} y \cos(x_i, \vec{n}) d\Sigma_0 + \int_Q \sum_{i=1}^n z_{,i} y_{,i} dQ = \\ &= - \int_{\Sigma_0} \frac{\partial z}{\partial \vec{n}} y d\Sigma_0 + \int_Q \sum_{i=1}^n z_{,i} y_{,i} dQ = - \int_{\Sigma_0} v_{,i} y d\Sigma_0 + \int_Q \sum_{i=1}^n z_{,i} y_{,i} dQ. \end{aligned}$$

Розглянемо суму інтегралів $I_2 + I_6$:

$$\begin{aligned} I_2 + I_6 &= - \int_{\Sigma_0} v_i y d\Sigma_0 + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n z_{x_i} y_{x_i} dQ + \int_{\Sigma_0} z_i w d\Sigma_0 = \\ &= \int_{\Sigma_0} (e^{at} w_i)_i y d\Sigma_0 - \int_{\Sigma_0} (e^{at} y_i)_i w d\Sigma_0 + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n z_{x_i} y_{x_i} dQ = \\ &= - \int_{\Sigma_0} e^{at} y_i w_i d\Sigma_0 + \int_{\Sigma_0} e^{at} y_i w_i d\Sigma_0 + \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n z_{x_i} y_{x_i} dQ = \\ &= \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n z_{x_i} y_{x_i} dQ. \end{aligned}$$

Приймаючи до уваги крайові умови та вигляд функції y , робимо аналогічні перетворення:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n z_{x_i} y_{x_i} dQ &= - \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n e^{at} y_{x_i} y_{x_i} dQ = - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n e^{at} (y_{x_i}^2)_i dQ = \\ &= - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n (e^{at} y_{x_i}^2)_i dQ + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \alpha e^{at} y_{x_i}^2 dQ = \\ &= - \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n (e^{at} y_{x_i}^2) \Big|_{t=0}^T d\Omega + \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n e^{at} y_{x_i}^2 dQ = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n y_{x_i}^2(x, 0) d\Omega + \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n e^{at} y_{x_i}^2 dQ \geq \\ &\geq \frac{\alpha}{2} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^n e^{at} y_{x_i}^2 dQ. \end{aligned}$$

Розглянемо третій інтеграл:

$$\begin{aligned} I_3 &= \int_{\Sigma_0} v_{ii} w d\Sigma_0 = - \int_{\Sigma_0} v_i w_i d\Sigma_0 = \int_{\Sigma_0} (e^{at} w_{ii} + \alpha e^{at} w_i) w_i d\Sigma_0 = \\ &= \int_{\Sigma_0} \left(\frac{1}{2} e^{at} (w_i^2)_i + \alpha e^{at} w_i^2 \right) d\Sigma_0 = \frac{1}{2} \int_{\Sigma_0} (e^{at} w_i^2)_i d\Sigma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{at} w_i^2 d\Sigma_0 = \\ &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_0} (e^{at} w_i^2) \Big|_{t=0}^T d\Gamma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{at} w_i^2 d\Sigma_0 = \frac{1}{2} \int_{\Gamma_0} e^{at} w_i^2(x, T) d\Gamma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{at} w_i^2 d\Sigma_0. \end{aligned}$$

Розглянемо четвертий інтеграл. Роблячи перетворення, аналогічні тим, що ми робили и для другого інтегралу, отримаємо:

$$\begin{aligned}
 I_4 &= \int_{\Sigma_0} \Delta^2 v w d\Sigma_0 = \int_{\Sigma_0} \Delta v \Delta w d\Sigma_0 = \\
 &= - \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} \Delta w_i \Delta w d\Sigma_0 = - \frac{1}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} \frac{\partial}{\partial t} (\Delta w)^2 d\Sigma_0 = \\
 &= - \frac{1}{2} \int_{\Sigma_0} \frac{\partial}{\partial t} (e^{\alpha t} (\Delta w)^2) d\Sigma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w)^2 d\Sigma_0 = \\
 &= \frac{1}{2} \int_{\Gamma_0} (e^{\alpha t} (\Delta w)^2) \Big|_{t=0} d\Gamma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w)^2 d\Sigma_0 \geq \\
 &\geq \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w)^2 d\Sigma_0.
 \end{aligned}$$

І, нарешті, перейдемо до п'ятого інтегралу, аналогічно:

$$\begin{aligned}
 I_5 &= \int_{\Sigma_0} \Delta^2 v_i w d\Sigma_0 = - \int_{\Sigma_0} \sum_{i=1}^n (\Delta v_i)_{,i} w_i d\Sigma_0 = \int_{\Sigma_0} \Delta v_i \Delta w d\Sigma_0 = \\
 &= - \int_{\Sigma_0} \Delta v \Delta w_i d\Sigma_0 = \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} \Delta w_i \Delta w_i d\Sigma_0 = \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w_i)^2 d\Sigma_0.
 \end{aligned}$$

Покладаючи $\alpha = 1$, вираз для всього скалярного буде мати вигляд:
 $(L\varphi, \psi) \geq$

$$\begin{aligned}
 &\geq \frac{\alpha}{2} \int_Q e^{\alpha t} y_i^2 dQ + \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} e^{\alpha t} y_i^2(x, T) dQ + \frac{\alpha}{2} \int_Q \sum_{i=1}^n e^{\alpha t} y_i^2 dQ + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} w_i^2 d\Sigma_0 + \\
 &+ \frac{1}{2} \int_{\Gamma_0} e^{\alpha t} w_i^2(x, T) d\Gamma_0 + \frac{\alpha}{2} \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w)^2 d\Sigma_0 + \int_{\Sigma_0} e^{\alpha t} (\Delta w_i)^2 d\Sigma_0 \geq \\
 &\geq \frac{1}{2} \int_Q (y_i^2 + \sum_{i=1}^n y_i^2) dQ + \frac{1}{2} \int_{\Sigma_0} (w_i^2 + (\Delta w)^2 + (\Delta w_i)^2) d\Sigma_0 + \\
 &+ \frac{1}{2} \int_0^T \int_{\Omega} e^{\alpha t} y_i^2(x, T) dQ + \frac{1}{2} \int_{\Gamma_0} e^{\alpha t} w_i^2(x, T) d\Gamma_0 \geq \\
 &\geq \frac{1}{2} \left(\|\psi\|_{W_1^1}^2 + \int_0^T \int_{\Omega} e^{\alpha t} y_i^2(x, T) dQ + \int_{\Gamma_0} e^{\alpha t} w_i^2(x, T) d\Gamma_0 \right).
 \end{aligned}$$

В останній рівності ми скористалися нерівністю:

$$C_1 \|u\|_{W_1^1} \leq \|\Delta u\|_{W_1^1} \leq C_2 \|u\|_{W_1^1}, \text{ де } u \in W_1^1. \quad (0.22)$$

Користуючись (0.19), (0.20) та нерівністю Шварца, отримаємо:

$$\begin{aligned} \|L\varphi\|_W \| \psi \|_W &\geq (L\varphi, \psi) \geq \\ &\geq \frac{1}{2} \left(\| \psi \|_W^2 + e^{-\tau} \int_{\Omega} z^2 \Big|_{t=\tau} d\Omega + e^{-\tau} \int_{\Gamma_0} v^2 \Big|_{t=\tau} d\Gamma_0 \right) \geq \\ &\geq C_1 \left(\| \psi \|_W^2 + \| z \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Omega)}^2 + \| v \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Gamma_0)}^2 \right), \end{aligned}$$

де $C_1 = \frac{1}{2} \min(1, e^{-\tau})$.

І, отже:

$$\|L\varphi\|_W \geq C_1 \left(\| \psi \|_W^2 + \| z \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Omega)}^2 + \| v \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Gamma_0)}^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (0.23)$$

Тепер розглянемо вираз для $\| \psi \|_W^2$. Користуючись (0.19), (0.20) та нерівністю (0.22), отримаємо:

$$\begin{aligned} \| \psi \|_W^2 &= \int_Q \left(y_i^2 + \sum_{i=1}^n y_i^2 \right) dQ + \int_{\Sigma_0} \left(w_i^2 + (\Delta w)^2 + (\Delta w_i)^2 \right) d\Sigma_0 \geq \\ &\geq \int_Q y_i^2 dQ + \int_{\Sigma_0} \left(w_i^2 + (\Delta w_i)^2 \right) d\Sigma_0 = \\ &= \int_Q e^{-2t} z^2 dQ + \int_{\Sigma_0} \left(e^{-2t} v^2 + (e^{-t} \Delta v)^2 \right) d\Sigma_0 \geq \\ &\geq e^{-2\tau} \int_Q z^2 dQ + e^{-2\tau} \int_{\Sigma_0} \left(v^2 + (\Delta v)^2 \right) d\Sigma_0 \geq \\ &\geq C_2 \left(\int_Q z^2 dQ + \int_{\Sigma_0} \left(v^2 + (\Delta v)^2 \right) d\Sigma_0 \right), \end{aligned}$$

де $C_2 = e^{-2\tau}$.

Підставляючи отриманий вираз в (0.23), та користуючись нерівністю (0.22), отримаємо:

$$\begin{aligned} \|L\varphi\|_W &\geq C \left(\int_Q z^2 dQ + \int_{\Sigma_0} \left(v^2 + (\Delta v)^2 \right) d\Sigma_0 + \| z \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Omega)}^2 + \| v \Big|_{t=\tau} \|_{L_2(\Gamma_0)}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= C \| (z, v) \|_H = C \| \varphi \|_H. \end{aligned}$$

Аналогічно лема доводиться і для спряженого оператора.

Користуючись доведеними вище лемами, та [5] отримаємо наступну теорему.

УДК 517.929

Ірина В. Грицай.

Iryna V. Grytsay.

Оцінки стійкості стану
рівноваги системи Лотки-
Вольтерра з запізненням на
площині

Estimates of Stability of
Equilibrium Point of Delay Lotka-
Volterra System on Plane

В статті розглядаються основні
типи моделей системи Лотки-
Вольтерра. Отримано умови та
область асимптотичної стійкості
нульових розв'язків.

The article is about the main
models of Lotka-Volterra system. The
conditions and the domain of asymptotic
stability of zero solutions are obtained.

E-mail: grytsay@univ.kiev.ua

1. Основні типи моделей з запізненням

1. Найпростіша модель динаміки популяцій типу «хижак-жертва» має вигляд системи двох диференціальних рівнянь з квадратичною правою частиною [1]

$$\dot{x}(t) = [a - by(t)]x(t), \quad \dot{y}(t) = -[c - dx(t)]y(t). \quad (1)$$

Система має стан рівноваги $M^*(x_0^*, y_0^*)$, $x_0^* = \frac{c}{d}$, $y_0^* = \frac{a}{b}$, $a > 0$, $b > 0$, $c > 0$, $d > 0$, який є стійким за Ляпуновим, а траєкторії в області додатності утворюють всюди щільну множину циклів.

Більш адекватною моделлю, яка описує динаміку розвитку популяцій, є система рівнянь з запізненням

$$\dot{x}(t) = [a - by(t - \tau)]x(t), \quad \dot{y}(t) = -[c - dx(t - \tau)]y(t). \quad (2)$$

Система, також, має стан рівноваги в точці $M^*(x_0^*, y_0^*)$. Проте, при довільному, як завгодно малому запізненні $\tau > 0$, стан рівноваги є нестійким [5].

2. В роботі [2] була запропонована модифікація двовимірної моделі Вольтерра. Один з варіантів цієї моделі може бути представлений системою диференціальних рівнянь

$$\dot{x}(t) = [-ax(t) + b]x(t) - kx(t)y(t), \quad \dot{y}(t) = [cx(t) - d]y(t),$$

де $a > 0$, $b > 0$, $c > 0$, $d > 0$, $k > 0$. Якщо припустити наявність ефекту «запізнення», то система прийме вигляд

$$\dot{x}(t) = [-ax(t - \tau) + b]x(t) - kx(t - \tau)y(t), \quad \dot{y}(t) = [cx(t - \tau) - d]y(t).$$

Система має стан рівноваги в точці $M_1^*(x_1^*, y_1^*)$, $x_1^* = \frac{c}{d}$, $y_1^* = \frac{bd - ac}{kd}$.

Якщо виконується умова $bd - ac > 0$, то точка спокою $M_1^*(x_1^*, y_1^*)$ знаходиться в області додатності площини xOy . Покладемо

$$x(t) = x_1(t) + x_1^*, \quad y(t) = y_1(t) + y_1^*.$$

Тоді одержану систему можна записати в стандартному векторно-матричному вигляді

$$\dot{z}(t) = A_1 z(t - \tau) + Z^T(t) B_1 z(t - \tau), \quad (3)$$

де

$$A_1 = \begin{bmatrix} -a \frac{c}{d} & -k \frac{c}{d} \\ c \frac{bd - ac}{kd} & 0 \end{bmatrix}, \quad B_1 = \begin{bmatrix} -a & -k \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix}, \quad z(t - \tau) = \begin{pmatrix} x_1(t - \tau) \\ y_1(t - \tau) \end{pmatrix},$$

$$Z(t) = \begin{bmatrix} x_1(t) & y_1(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & x_1(t) & y_1(t) \end{bmatrix}. \quad (4)$$

3. Як відмічено в [1], стан рівноваги $M^*(x_0^*, y_0^*)$ системи (2) можна стабілізувати за допомогою введення членів, які «характеризують дисипацію». Розглянемо стабілізацію нелінійної системи за рахунок введення членів з запізненням, тобто розглянемо систему вигляду

$$\dot{x}(t) = [a - gx(t - \tau) - by(t - \tau)]x(t), \quad \dot{y}(t) = [-c - dx(t - \tau) - hy(t - \tau)]y(t). \quad (5)$$

В системі (5) стан рівноваги є: $M^*(x_2^*, y_2^*)$, $x_2^* = \frac{bc - ah}{bd - gh}$, $y_2^* = \frac{ad - cg}{bd - gh}$.

Якщо виконуються умови $bc - ah > 0$, $ad - cg > 0$, $bd - gh > 0$, то точка спокою знаходиться в області додатності. Покладемо

$$x(t) = x_1(t) + x_2^*, \quad y(t) = y_1(t) + y_2^*.$$

Тоді система набуде вигляду

$$\dot{z}(t) = A_2 z(t - \tau) + Z^T(t) B_2 z(t - \tau), \quad (6)$$

де

$$A_2 = \begin{bmatrix} -gx_2^* & -bx_2^* \\ dy_2^* & hy_2^* \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} -g & 0 \\ -b & 0 \\ 0 & d \\ 0 & h \end{bmatrix}. \quad (7)$$

2. Методи дослідження стійкості стан рівноваги моделі динаміки популяції з запізненням

Наведемо деякі основні результати дослідження динаміки систем з квадратичною правою частиною та з чистим запізненням в лінійній частині.

В роботі [3] розглядалась лінійна стаціонарна система з чистим запізненням

$$\dot{z}(t) = Az(t - \tau), \quad x(t) \in R^n, \quad t \geq 0, \quad \tau > 0.$$

Доведено наступне твердження.

Теорема 1. [3]. Для асимптотичної стійкості лінійної стаціонарної системи з чистим запізненням, необхідно й досить, щоб корені $\mu_i = -p_i \pm iq_i$, $i = \overline{1, k}$, $\mu_j = -p_j$, $j = \overline{1, s}$, $2k + s = n$ характеристичного рівняння матриці A

$$\det\{A - \mu I\} = 0 \Leftrightarrow \mu^n + a_1 \mu^{n-1} + \dots + a_{n-1} \mu + a_n = 0$$

мали від'ємні дійсні частини, тобто $p_i > 0$, $i = \overline{1, n}$ і належали інтервалам

$$\tau \sqrt{p_i^2 + q_i^2} < \frac{\pi}{2} - \arctg \frac{q_i}{p_i}, \quad i = \overline{1, k}, \quad \tau p_j < \frac{\pi}{2}, \quad j = \overline{1, s}, \quad 2k + s = n.$$

Пізніше, в роботі [4], розглядалась нелінійна система з квадратичною правою частиною

$$\dot{z}(t) = Az(t - \tau) + Z^T(t)Bz(t - \tau), \quad (8)$$

з фазовими змінними $z(t) \in R^n$. Тут A - квадратна матриця з сталими коефіцієнтами, $Z^T(t)$, B - прямокутні $n \times n^2$ та $n^2 \times n$ матриці вигляду $Z^T(t) = \{Z_1^T(t), Z_2^T(t), \dots, Z_n^T(t)\}$, $B = \{B_1^T, B_2^T, \dots, B_n^T\}$, де $Z_i^T(t)$, $i = \overline{1, n}$ - квадратні матриці, в яких на місці i -того рядка стоїть вектор-рядок $z^T(t) = (z_1(t), z_2(t), \dots, z_n(t))$, а решта елементів нульові; B_i , $i = \overline{1, n}$ - квадратні матриці з сталими коефіцієнтами.

Було одержано наступний результат. Нехай C - довільна додатно визначена матриця, H - симетрична, додатно визначена матриця, яка є розв'язком матричного рівняння Ляпунова

$$A^T H + H A = -C. \quad (9)$$

Позначимо

$$a = \frac{1}{\lambda_{\min}(H)} \left\{ \lambda_{\min}(C) - \gamma \lambda_{\max}(H) - 4 \|HA\| \frac{|A|}{\gamma} e^{\frac{1}{2}\tau} \left(e^{\frac{1}{2}\tau} - 1 \right) \right\} \sqrt{\varphi(H)},$$

$$b = \frac{2}{\lambda_{\min}(H)} - |B| \sqrt{\varphi(H)} e^{\frac{1}{2}\tau} \left\{ \|HA\| \sqrt{\varphi(H)} \frac{1}{\gamma} (e^{\tau} - 1) + \lambda_{\max}(H) \right\}, \quad \varphi(H) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)}}.$$

Під векторними і матричними нормами розуміємо

$$|z(t)| = \left\{ \sum_{i=1}^n z_i^2(t) \right\}^{1/2}, \quad \|z(0)\|_{\tau} = \max_{-r \leq s \leq 0} \|z(s)\|, \quad |A| = \{\lambda_{\max}(A^T A)\}^{1/2},$$

де $\lambda_{\max}(\cdot)$, $\lambda_{\min}(\cdot)$ - максимальне та мінімальне власні числа відповідних симетричних, додатно визначених матриць.

Теорема 2. [4]. Нехай матриця A асимптотично стійка. Тоді при $\tau < \tau_0$, де

$$\tau_0 = \frac{\lambda_{\min}(C)}{2 \|A\| \|HA\| \sqrt{\varphi(H)}}, \quad (10)$$

нульовий розв'язок $z(t) = 0$ системи (3) буде асимптотично стійким, а область стійкості містить кулю U_{δ} радіусу δ , який є розв'язком рівняння

$$(1 + |A|\tau) \delta e^{|\delta|\delta\tau} = \frac{a + \gamma}{b \sqrt{\lambda_{\max}(H)}}. \quad (11)$$

Причому для розв'язків $z(t)$ з початковими даними з кулі U_δ справедлива оцінка збіжності

$$|z(t)| < \frac{\sqrt{\varphi(H)} \|z(0)\|_\tau e^{-\frac{1}{2}(a+\gamma)t}}{1 - \frac{b}{a+\gamma} \left[1 - e^{-\frac{1}{2}(a+\gamma)t} \right] \sqrt{\lambda_{\max}(H)} \|z(0)\|_\tau}, \quad (12)$$

$0 < \gamma < \gamma^*$, де γ^* - розв'язок рівняння

$$\gamma [\lambda_{\min}(C) - \gamma \lambda_{\max}(H)] = 4 \|HA\| A \sqrt{\varphi(H)} e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} \left(e^{\frac{1}{2}\gamma\tau} - 1 \right). \quad (13)$$

3. Дослідження моделей систем з запізненням

Використовуючи приведені в попередньому розділі результати досліджень систем загального вигляду з квадратичною правою частиною та запізненням, одержимо оцінки збіжності розв'язків систем типу Вольтерра.

1. Розглянемо систему Вольтерра з запізненням (2). Характеристичне рівняння лінійної частини системи має вигляд

$$\lambda^2 + \omega^2 e^{-2\lambda\tau} = 0, \quad \omega^2 = ac > 0.$$

При будь-якому $\tau > 0$ є хоча б один корінь з додатною дійсною частиною [5]. Причому цей корінь $\lambda = x + iy$ знаходиться в області $0 \leq x \leq \omega$, $-\omega \leq y \leq \omega$.

2. Розглянемо модель динаміки популяції Колмогорова з запізненням. Характеристичне рівняння матриці A_1 , як випливає з (4), має вигляд

$$\mu^2 + a \frac{c}{d} \mu + \left(\frac{c}{d} \right)^2 (bd - ac) = 0.$$

2.1. Якщо виконуються умови $a^2 - 4(bd - ac) \geq 0$, то характеристичне рівняння має два дійсні корені

$$\mu_1 = -\frac{c}{2d} \left[a + \sqrt{a^2 - 4(bd - ac)} \right], \quad \mu_2 = -\frac{c}{2d} \left[a - \sqrt{a^2 - 4(bd - ac)} \right].$$

Як випливає з теореми 1, умовою стійкості нульового розв'язку системи (3) буде виконання системи нерівностей

$$0 < \frac{c}{2d} \left[a + \sqrt{a^2 - 4(bd - ac)} \right] < \frac{\pi}{2\tau}, \quad 0 < \frac{c}{2d} \left[a - \sqrt{a^2 - 4(bd - ac)} \right] < \frac{\pi}{2\tau}. \quad (14)$$

2.2. Якщо виконується умова $a^2 - 4(bd - ac) < 0$, то корені комплексно спряжені

$$\mu_{1,2} = \frac{ac}{2d} \pm i \frac{c}{2d} \sqrt{4(bd - ac) - a^2}.$$

Умова стійкості має вигляд

$$\tau \frac{c}{d} \sqrt{bd - ac} < \frac{\pi}{2} - \arctg \frac{\sqrt{4(bd - ac) - a^2}}{a}. \quad (15)$$

Скориставшись результатами теореми 2, одержимо оцінки області стійкості нульового стану рівноваги нелінійної системи з квадратичною правою частиною (3), (4). Матриця $A = A_1$ є стійкою, тому при довільній додатно визначеній матриці C_1 матричне рівняння Ляпунова (9) має єдиний розв'язок – додатно визначену матрицю $H = H_1$. Поклавши $C_1 = 2I$, де I – одинична матриця, одержимо, що розв'язком рівняння буде

$$H_1 = \begin{bmatrix} h_{11}^1 & h_{12}^1 \\ h_{12}^1 & h_{22}^1 \end{bmatrix}, \quad h_{11}^1 = \frac{d}{ac} \left(1 + \frac{\Delta}{k^2} \right), \quad h_{12}^1 = \frac{d}{kc}, \quad h_{22}^1 = \frac{ad}{c\Delta} (a^2 + \Delta + k^2), \quad \Delta = bd - ac.$$

Власні числа матриці H_1 мають вигляд

$$\begin{aligned} \lambda_{\max}(H_1) &= \frac{1}{2} \left[(h_{11}^1 + h_{22}^1) + \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2} \right], \\ \lambda_{\min}(H_1) &= \frac{1}{2} \left[(h_{11}^1 + h_{22}^1) - \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2} \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Знаходимо

$$\lambda_{\min}(C_1) = 2, \quad \varphi(H_1) = \frac{\lambda_{\max}(H)}{\lambda_{\min}(H)} = \frac{(h_{11}^1 + h_{22}^1) + \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2}}{(h_{11}^1 + h_{22}^1) - \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2}}.$$

Можна покласти

$$\begin{aligned} |A_1| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left(\frac{c}{d} \right)^2 \left[a^2 + k^2 + \left(\frac{c\Delta}{k} \right)^2 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{c}{d} \sqrt{\left[k^2 - \left(\frac{c\Delta}{k} \right)^2 \right]^2 + a^2 \left[a^2 + 2k^2 + 2\frac{c\Delta}{k} \right]^2} \right\}^{1/2}, \\ |B_1| &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ k^2 + a^2 + c^2 + \sqrt{(k^2 - c^2)^2 + a^2(a^2 + 2k^2 + 2c^2)} \right\}^{1/2}. \end{aligned}$$

Враховуючи

$$|H_1 A_1| \leq |A_1| \lambda_{\max}(H),$$

маємо

$$|H_1 A_1| \leq \frac{1}{2} |A_1| \left[(h_{11}^1 + h_{22}^1) + \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2} \right].$$

Величина τ_0 , яка гарантує асимптотичну стійкість нульового розв'язку нелінійної системи (3), (4), має вигляд

$$\tau_0 \leq \frac{\left[(h_{11}^1 + h_{22}^1) - \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2} \right]^{1/2}}{|A_1|^2 \left[(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + \sqrt{(h_{11}^1 - h_{22}^1)^2 + 4(h_{12}^1)^2} \right]^{3/2}}.$$

Гарантована область стійкості U_s та оцінка збіжності обчислюються чисельно згідно (11) та (12).

3. Розглянемо загальну модель двовимірної динаміки популяції з запізненням. Характеристичне рівняння матриці A_2 , лінійної частини системи, як впливає з (7), має вигляд

$$\mu^2 + (gx_2^* - hy_2^*)\mu + (bd - gh)x_2^*y_2^* = 0.$$

3.1. Якщо виконується нерівність $(gx_2^* + hy_2^*)^2 - 4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2 \geq 0$, то характеристичне рівняння матриці A_2 має два дійсні корені

$$\mu_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[(gx_2^* - hy_2^*) \pm \sqrt{(gx_2^* + hy_2^*)^2 - 4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2} \right].$$

Умовами стійкості є

$$0 < (gx_2^* - hy_2^*) \pm \sqrt{(gx_2^* + hy_2^*)^2 - 4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2} < \frac{\pi}{\tau}.$$

3.2. Якщо виконується $(gx_2^* + hy_2^*)^2 - 4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2 < 0$, то рівняння має комплексно спряжені корені

$$\mu_{1,2} = \frac{1}{2} \left[-(gx_2^* - hy_2^*) \pm i \sqrt{4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2 - (gx_2^* + hy_2^*)^2} \right].$$

Умови стійкості набуває вигляду

$$\frac{\tau}{2} \sqrt{(gx_2^* - hy_2^*)^2 + 4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2 - (gx_2^* + hy_2^*)^2} < \frac{\pi}{2} - \arctg \frac{\sqrt{4bd(x_2^*)^2(y_2^*)^2 - (gx_2^* + hy_2^*)^2}}{gx_2^* - hy_2^*}.$$

Нехай матриця $A = A_2$ асимптотично стійка. Покладемо $C = \begin{bmatrix} c_1 & 0 \\ 0 & c_2 \end{bmatrix}$,

$c_1 > 0$, $c_2 > 0$. Одержимо, що розв'язком матричного рівняння Ляпунова (9) буде $H = H_2$, де

$$H_2 = \begin{bmatrix} h_{11}^2 & h_{12}^2 \\ h_{12}^2 & h_{22}^2 \end{bmatrix}, \quad h_{11}^2 = \frac{2dy_2^* \Delta - c_1}{2gx_2^*}, \quad h_{12}^2 = \Delta, \quad h_{22}^2 = \frac{c_2 + 2bx_2^* \Delta}{2hy_2^*},$$

$$\Delta = \frac{c_1bh + c_2gd}{2(gh - bd)(hy_2^* - gx_2^*)}.$$

Власні числа матриці H_2 мають вигляд (16), замінивши h_{11}^1 , h_{12}^1 , h_{22}^1 відповідно на h_{11}^2 , h_{12}^2 , h_{22}^2 . Крім того,

$$\lambda_{\min}(C) = \min\{c_1, c_2\}, \quad \varphi(H_2) = \frac{(h_{11}^2 + h_{22}^2) + \sqrt{(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + 4(h_{12}^2)^2}}{(h_{11}^2 + h_{22}^2) - \sqrt{(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + 4(h_{12}^2)^2}},$$

$$|A_2| = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left[(g^2 + b^2)(x_2^*)^2 + (d^2 + h^2)(y_2^*)^2 \right] + \right.$$

$$\left. + \sqrt{\left[(g^2 - b^2)(x_2^*)^2 + (d^2 - h^2)(y_2^*)^2 \right]^2 + 4[bg(x_2^*)^2 + dh(y_2^*)^2]^2} \right\}^{1/2}.$$

$$|B_2| = \sqrt{\max\{g^2 + b^2, d^2 + h^2\}}.$$

Враховуючи оцінку

$$|HA_2| \leq |A_2| \lambda_{\max}(H),$$

одержимо

$$|H_2 A_2| \leq \frac{1}{2} |A_2| \left[(h_{11}^2 + h_{22}^2) + \sqrt{(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + 4(h_{12}^2)^2} \right].$$

Величина τ_0 , яка гарантує асимптотичну стійкість нульового розв'язку системи (6), (7), має вигляд

$$\tau_0 \leq \frac{\min\{c_1, c_2\} \left[(h_{11}^2 + h_{22}^2) - \sqrt{(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + 4(h_{12}^2)^2} \right]^{1/2}}{2|A_2|^2 \left[(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + \sqrt{(h_{11}^2 - h_{22}^2)^2 + 4(h_{12}^2)^2} \right]^{3/2}}.$$

Гарантована область стійкості U_s та оцінка збіжності обчислюються чисельно, згідно (11) та (12).

Отримані результати описують можливість, стабілізації станів рівноваги математичних моделей системи Лотки-Вольтерра за допомогою введення додаткових членів з запізненням. Знайдено область стійкості та умови збіжності розв'язків.

ЛІТЕРАТУРА

1. Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. – М., Наука, 1976. – 286 с.
2. Колмогоров А.Н. Качественное изучение математических моделей динамики популяций. – В сб.: Проблемы кибернетики, в.25, 1972. – С.100-106.
3. Khusainov D.Ya., Grytsay I.V. Stabilization of Stationary Solution of Lotka-Volterra System with Delay//Studies of the University of Žilina, Mathematical Ser., 2006, pp. 35-45.
4. Khusainov D.Ya., Ivanov A.F., Grytsay I.V. Stability of Delay Systems with Quadratic Nonlinearities//Nonlinear Dynamics and Systems Theory, 2006, v3, pp. 355-365.
5. Колесников К.С., Коварж І.В., Грицай І.В. Дослідження розподілу характеристичних показників коливального рівняння з запізненням//Вісник Київського університету. Серія: Фізико-математичні науки, в.3, 2004. – С.238-243.

Надійшла до редакції 15.04.2006 р

Йозеф Діблік*, Тимур Д. Хусаїнов,
Денис Я. Хусаїнов

Josef Diblik*, Timur D. Khusainov,
Denys Ya. Khusainov**

**Побудова загального розв'язку
лінійних однорідних систем зі
слабким запізненням**

**On construction of solution of linear
homogeneous systems with weak
delay**

Розглядаються системи лінійних дискретних рівнянь з запізненням, характеристичне рівняння яких співпадає з характеристичним рівнянням матриці при поточній координаті. Системи такого типу названі системами із слабким запізненням. Одержано розв'язок задачі Коші системи на площині.

Ключові слова: дискретні системи, запізнення, задача Коші, початкові умови.

Systems of linear discrete equations with delay are considered. Corresponding generalized characteristic equations are equal to characteristic equations of non-delayed systems. Systems of this type are called systems with weak delay. Solution of Cauchy problem for the plane system with weak delay is constructed.

Key Words: Discrete systems, delay, Cauchy problem, initial conditions.

*E-mail: diblik@feec.vutbr.cz, dkh@unicyb.kiev.ua

Вступ

При дослідженні систем диференціально-різницевих рівнянь з запізненням ще в роботі [1] було відмічено наступний факт. По своїй суті розв'язки цих рівнянь утворюють нескінченновимірний простір, і базис їх розв'язків утворює злічену множину. В той же час було наведено приклад існування системи трьох диференціальних рівнянь з тривимірним базисом. Лінійні системи диференціально-різницевих рівнянь з запізненням, що мали таку властивість, були названі системами зі слабким запізненням [2]. Особливістю таких систем є те, що їх характеристичні рівняння співпадають із характеристичними рівняннями матриці при поточній координаті, тобто спектр системи є скінченновимірним. Перенесемо результати, що одержані для диференціальних рівнянь із слабким запізненням [2] на лінійні дискретні системи з запізненням [3,4].

Основний результат

Розглянемо систему лінійних дискретних рівнянь із запізненням вигляду

$$\Delta[x(k)] = A_0 x(k) + Bx(k-m),$$

де $m > 0$ – натуральне число. Цю систему можна записати у вигляді

*The author have been supported by Grant No 201/04/0580 of the Czech Grant Agency (Prague) and by the Council of Czech Government MSM 00216 30503. **The author have been supported by Grant MFO (Oberwolfach, Germany).

$$x(k+1) = Ax(k) + Bx(k-m), \quad A = A_0 + I. \quad (2)$$

Задача Коші полягає у тому, щоб знайти послідовність $x(1), x(2), \dots, x(n), \dots$, яка тотожно задовольняє системі та початковим умовам $x(-m) = x_{-m}^0$, $x(-m+1) = x_{-m+1}^0, \dots, x(0) = x_0^0$.

При побудові загального розв'язку лінійної системи складається характеристичне рівняння

$$\det(A + \lambda^{-m}B - \lambda I) = 0. \quad (3)$$

Розкривши, одержується алгебраїчне рівняння степеня $(m+1)n$. Якщо вплив запізнення, тобто матриці B , незначний, то можлива ситуація, при якій характеристичне рівняння дискретної системи із запізненням (2) та матриці A , що відповідає за поточну фазову координату, співпадають.

Визначення 1. Система (2) називається системою зі слабким запізненням, якщо

$$\det(A + \lambda^{-m}B - \lambda I) = \det(A - \lambda I). \quad (4)$$

В цьому випадку власні числа системи з запізненням (2) співпадають з власними числами системи без запізнення

$$x(k+1) = Ax(k),$$

і через n кроків відбувається „злипання” розв'язків системи із запізненням.

Розглянемо двовимірний випадок. Система (2) має вигляд

$$\begin{aligned} x_1(k+1) &= a_{11}x_1(k) + a_{12}x_2(k) + b_{11}x_1(k-m) + b_{12}x_2(k-m), \\ x_2(k+1) &= a_{21}x_1(k) + a_{22}x_2(k) + b_{21}x_1(k-m) + b_{22}x_2(k-m), \end{aligned} \quad (5)$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}.$$

Визначимо умови слабого запізнення системи вигляду (5).

Теорема 1. Щоб система із запізненням (5) була системою зі слабким запізненням, необхідно і достатньо, щоб виконувались умови

$$b_{11} + b_{22} = 0, \quad \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = 0. \quad (6)$$

Доведення. Розкриємо характеристичне рівняння системи (5).

$$\begin{aligned} \det(A + \lambda^{-m}B - \lambda I) &= \begin{vmatrix} (a_{11} + b_{11}\lambda^{-m}) - \lambda & a_{12} + b_{12}\lambda^{-m} \\ a_{21} + b_{21}\lambda^{-m} & (a_{22} + b_{22}\lambda^{-m}) - \lambda \end{vmatrix} = \\ &= \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} - \lambda^{-m+1}(b_{11} + b_{22}) + \\ &+ \lambda^{-m} \left[\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix} + \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \right] + \lambda^{-2m} \begin{vmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{vmatrix}. \end{aligned}$$

Щоб одержане характеристичне рівняння мало вигляд

$$\det(A + \lambda^{-m}B - \lambda I) = \det(A - \lambda I) = \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}),$$

необхідно і достатньо виконання умов (6).

Розглянемо можливість отримати розв'язок початкової задачі (задачі Коші) для системи (5).

Теорема 2. Нехай параметри системи (5) задовольняють умовам (6). Тоді виконуються наступні твердження.

1. Якщо матриця A має комплексно-спряжені власні числа, то система зі слабким запізненням вироджується в систему без запізнення.

2. В інших випадках розв'язок має вигляд

$$x(k) = \begin{cases} A^k \varphi(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \varphi^*(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ A^k \varphi(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \varphi^*(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \lambda_2^{k-m-(j+1)} \lambda_1^j \right] \varphi^*(0), & k = m+2, m+3, \dots \end{cases} \quad \text{В}$$

цій залежності S – неособлива матриця, що приводить A до жорданової форми Λ ,

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix} \text{ або } \Lambda = \begin{bmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}, \quad \bar{B} = S^{-1}BS = \begin{bmatrix} \bar{b}_{11} & \bar{b}_{12} \\ \bar{b}_{21} & \bar{b}_{22} \end{bmatrix}, \quad S = \begin{bmatrix} \alpha & \gamma \\ \beta & \delta \end{bmatrix},$$

$$\bar{\varphi}(k) = S\varphi(k), \quad \varphi(k) = \begin{pmatrix} \varphi_1(k) \\ \varphi_2(k) \end{pmatrix}, \quad \bar{\varphi}(k) = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_1(k) \\ \bar{\varphi}_2(k) \end{pmatrix}, \quad \bar{\varphi}^*(k) = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_2(k) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \bar{\varphi}^{**}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{\varphi}_1(k) \end{pmatrix}.$$

Доведення. Розглянемо можливі випадки вигляду матриці Λ .

I. Нехай корені λ_1, λ_2 характеристичного рівняння

$$\lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0$$

матриці A дійсні різні та не рівні одиниці. Тоді, якщо зробити невироджене перетворення

$$y(k) = Sx(k),$$

система (5) перетворюється у систему

$$y(k+1) = \Lambda y(k) + \bar{B}y(k-m), \quad (7)$$

де

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}, \quad \bar{B} = S^{-1}BS = \begin{bmatrix} \bar{b}_{11} & \bar{b}_{12} \\ \bar{b}_{21} & \bar{b}_{22} \end{bmatrix}, \quad y(k) = \begin{pmatrix} y_1(k) \\ y_2(k) \end{pmatrix}.$$

Оскільки перетворення лінійне, невироджене, то для системи зі слабким запізненням (5) перетворена система також є системою зі слабким запізненням. Умови (6) приймають вигляд

$$\bar{b}_{11} + \bar{b}_{22} = 0, \quad \lambda_1 \bar{b}_{22} + \lambda_2 \bar{b}_{11} = 0, \quad \bar{b}_{11} \bar{b}_{22} - \bar{b}_{12} \bar{b}_{21} = 0.$$

Оскільки $\lambda_1 \neq \lambda_2$, то, розв'язуючи перші два рівняння, отримуємо $\bar{b}_{11} = 0$, $\bar{b}_{22} = 0$. Звідси в третьому рівнянні буде або $\bar{b}_{12} = 0$, або $\bar{b}_{21} = 0$. Таким чином перетворена система може приймати вигляд

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} y_2(k-m), \\ y_2(k+1) = \lambda_2 y_2(k) \end{cases} \quad (8)$$

або

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda_1 y_1(k), \\ y_2(k+1) = \lambda_2 y_2(k) + \bar{b}_{21} y_1(k-m). \end{cases} \quad (9)$$

Якщо початкові умови для системи (5) мають вигляд $x_1(k) = \varphi_1(k)$, $x_2(k) = \varphi_2(k)$, $k = -m, -m+1, \dots, 0$, то після перетворення для системи (7) одержимо $y_1(k) = \bar{\varphi}_1(k)$, $y_2(k) = \bar{\varphi}_2(k)$, $k = -m, -m+1, \dots, 0$. Тут $\bar{\varphi}(k) = S\varphi(k)$, $k = -m, -m+1, \dots, 0$ або

$$\bar{\varphi}_1(k) = \alpha\varphi_1(k) + \gamma\varphi_2(k), \quad \bar{\varphi}_2(k) = \beta\varphi_1(k) + \delta\varphi_2(k).$$

Отримаємо розв'язок перетвореної системи (8). Система (9) розв'язується аналогічно. Розв'язок другого рівняння системи (8) має вигляд

$$y_2(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_2(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \lambda_2^k \bar{\varphi}_2(0), & k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Підставимо отриманий вираз в перше рівняння системи (8). Одержуємо лінійне неоднорідне рівняння

$$y_1(k+1) = \begin{cases} \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(k-m), & k = 0, 1, 2, \dots, m; \\ \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} \lambda_2^{k-m} \bar{\varphi}_2(0), & k = m+1, m+2, \dots \end{cases}$$

І розв'язок першого рівняння системи (8) має вигляд

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \sum_{j=0}^{k-1} [\bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(k-m-1-j)] \lambda_1^j, & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \left\{ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \sum_{j=0}^m [\bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(-j)] \lambda_1^j \right\} \lambda_1^{k-(m+1)} + \sum_{j=0}^{k-1} [\bar{b}_{12} \lambda_2^{k-m-(j+1)} \bar{\varphi}_2(0)] \lambda_1^j, & k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

Або, після перетворень,

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}_2(k-m-1-j) \lambda_1^j \right], & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \left\{ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}_2(-j) \lambda_1^j \right] \right\} \lambda_1^{k-(m+1)} + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \lambda_2^{k-m-(j+1)} \lambda_1^j \right], & k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

Якщо позначити

$$\Lambda^k = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & 0 \\ 0 & \lambda_2^k \end{bmatrix}, \bar{\varphi}(k) = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_1(k) \\ \bar{\varphi}_2(k) \end{pmatrix}, \bar{\varphi}^*(k) = \begin{pmatrix} \bar{\varphi}_2(k) \\ 0 \end{pmatrix}, \bar{\varphi}^{**}(k) = \begin{pmatrix} 0 \\ \bar{\varphi}_1(k) \end{pmatrix},$$

то розв'язок перетвореної системи (8) можна записати у вигляді

$$y(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}^*(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & \text{при } k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}^*(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \lambda_2^{k-m-(j+1)} \lambda_1^j \right] \bar{\varphi}^*(0), & \text{при } k = m+2, m+3, \dots \end{cases} \quad (10)$$

Очевидно, якщо розглядати систему (9), то розв'язок задачі Коші вигляд

$$y(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{21} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}^{**}(k-m-(j+1)) \lambda_2^j \right], & \text{при } k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{21} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}^{**}(-j) \lambda_2^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{21} \left[\sum_{j=0}^m \lambda_1^{k-m-(j+1)} \lambda_2^j \right] \bar{\varphi}^{**}(0), & \text{при } k = m+2, m+3, \dots \end{cases} \quad (11)$$

З вигляду залежності (10) (або (11)) видно, що після $(m+1)$ -го кроку розв'язок на $(k+1)$ -й ітерації залежить тільки від i -ї ітерації, тобто відбувається “злиття” розв'язків.

II. Нехай матриця A має комплексно-спряжені корені $\lambda_{1,2} = p \pm iq$. Тоді жорданова форма Λ записується у вигляді

$$\Lambda = \begin{bmatrix} p & q \\ -q & p \end{bmatrix}.$$

Умови “слабкого запізнення” (6) для перетвореної системи будуть мати вигляд

$$\bar{b}_{11} + \bar{b}_{22} = 0, \bar{b}_{11}\bar{b}_{22} - \bar{b}_{12}\bar{b}_{21} = 0, p(b_{11} + b_{22}) + q(b_{12} - b_{21}) = 0.$$

Звідси $\bar{b}_{11} = \bar{b}_{22} = \bar{b}_{12} = \bar{b}_{21} = 0$. Таким чином якщо матриця A має комплексно-спряжені корені, то перетворена (а звідси і початкова) система може бути тільки системою без запізнення

$$\begin{cases} y_1(k+1) = py_1(k) + qy_2(k), \\ y_2(k+1) = -qy_1(k) + py_2(k). \end{cases} \quad (12)$$

III.1. Нехай матриця A має кратні корені $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$ та матриця Λ має чисто діагональний вигляд

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}.$$

Тоді умови (6) перетворюються до

$$\bar{b}_{11} + \bar{b}_{22} = 0, \quad \bar{b}_{11}\bar{b}_{22} - \bar{b}_{12}\bar{b}_{21} = 0, \quad \lambda(b_{11} + b_{22}) = 0.$$

Розв'язуючи одержану систему рівнянь, отримаємо вид перетвореної матриці $\bar{B}$

$$\bar{B} = \begin{bmatrix} \bar{b}_{11} & \bar{b}_{12} \\ -\frac{\bar{b}_{11}^2}{\bar{b}_{12}} & -\bar{b}_{11} \end{bmatrix}.$$

Таким чином перетворена система має вигляд

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda y_1(k) + \bar{b}_{11}y_1(k-m) + \bar{b}_{12}y_2(k-m), \\ y_2(k+1) = \lambda y_2(k) - \frac{\bar{b}_{11}^2}{\bar{b}_{12}}y_1(k-m) - \bar{b}_{11}y_2(k-m). \end{cases} \quad (13)$$

Звідси

$$\left[y_1(k+1) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}y_2(k+1) \right] = \lambda \left[y_1(k) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}y_2(k) \right].$$

Розв'язуючи отримане дискретне рівняння, запишемо

$$y_1(k) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}y_2(k) = \left[\bar{\varphi}_1(0) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}\bar{\varphi}_2(0) \right] \lambda^k, \quad k = 1, 2, \dots$$

Повернувшись до вихідної системи (13), отримаємо

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda y_1(k) + \bar{b}_{11} \left[\bar{\varphi}_1(0) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}\bar{\varphi}_2(0) \right] \lambda^{k-m}, \\ y_2(k+1) = \lambda y_2(k) - \frac{\bar{b}_{11}^2}{\bar{b}_{12}} \left[\bar{\varphi}_1(0) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}\bar{\varphi}_2(0) \right] \lambda^{k-m}. \end{cases}$$

Ця система "розщеплена" і можна розв'язувати кожне рівняння окремо.

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0)\lambda^k + \bar{b}_{11} \left[\bar{\varphi}_1(0) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}\bar{\varphi}_2(0) \right] \sum_{j=0}^{k-1} \lambda^{j+1-m}, & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

$$y_2(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_2(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_2(0)\lambda^k - \frac{\bar{b}_{11}^2}{\bar{b}_{12}} \left[\bar{\varphi}_1(0) + \frac{\bar{b}_{12}}{\bar{b}_{11}}\bar{\varphi}_2(0) \right] \sum_{j=0}^{k-1} \lambda^{j+1-m}, & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Об'єднавши, отримаємо

$$y(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}(0)\Lambda^k + B^* \bar{\varphi}(0) \sum_{j=0}^{k-m} \lambda^{j+1-m}, & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases} \quad B^* = \begin{bmatrix} \bar{b}_{11} & \bar{b}_{12} \\ -\frac{b_{11}^2}{\bar{b}_{12}} & -\bar{b}_{11} \end{bmatrix}. \quad (14)$$

З вигляду залежностей (14) випливає, що “склеювання” відбувається вже при $k=1$.

П.2. Нехай матриця A має кратні корені $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda \neq 1$ та матриця Λ має вигляд

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda & 1 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}.$$

Тоді умови слабкого запізнення (6) приймуть вигляд

$$\bar{b}_{11} + \bar{b}_{22} = 0, \quad \bar{b}_{11}\bar{b}_{22} - \bar{b}_{12}\bar{b}_{21} = 0, \quad \lambda(b_{11} + b_{22}) - b_{12} = 0.$$

Звідси отримуємо $b_{11} = b_{22} = b_{12} = 0$. Перетворена система буде мати вигляд

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda y_1(k) + \bar{b}_{21} y_2(k-m) \\ y_2(k+1) = \lambda y_2(k), \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots$$

Розв'язком другого рівняння буде

$$y_2(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_2(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0 \\ \bar{\varphi}_2(0)\lambda^k, & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Підставимо отриманий вираз у перше рівняння. Отримаємо

$$y_1(k) = \begin{cases} \lambda y_1(k) + \bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(k-m), & \text{при } k = 0, 1, \dots, m; \\ \lambda y_1(k) + \bar{b}_{21} [\lambda^{k-m} \bar{\varphi}_2(0)], & \text{при } k = m+1, m+2, \dots \end{cases}$$

лінійне неоднорідне дискретне рівняння. Його розв'язок буде мати вигляд або

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0)\lambda^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}_2(k-m-1-j)\lambda^j \right], & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \bar{\varphi}_1(0)\lambda^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}_2(-j)\lambda^{k-(m-1)+j} \right] + \bar{b}_{12}\lambda^{k-m+1} \cdot k \bar{\varphi}_2(0), & k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

Таким чином, враховуючи приведені позначення, отримуємо

$$y(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}^*(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & \text{при } k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}^*(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \lambda_1^{k-m+1} \cdot k \bar{\varphi}^*(0), & \text{при } k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

І розв'язки після $(m+1)$ -го кроку “зліпаються”.

IV.1. Нехай маємо один корінь, який дорівнює одиниці, тобто $\lambda_1 \neq 1$, $\lambda_2 = 1$.
В цьому випадку після перетворень отримуємо систему

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{21} y_2(k-m) \\ y_2(k+1) = y_2(k), \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots$$

Розв'язком другого рівняння буде

$$y_2(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_2(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0 \\ \bar{\varphi}_2(0), & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

Перше рівняння приймає вигляд

$$y_1(k) = \begin{cases} \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(k-m), & \text{при } k = 0, 1, \dots, m; \\ \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} \bar{\varphi}_2(0), & \text{при } k = m+1, m+2, \dots \end{cases}$$

І його розв'язком буде

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}_2(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \bar{\varphi}_1(0) \lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}_2(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \cdot k \bar{\varphi}_2(0), & k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

IV.2. Нехай обидва корені дорівнюють одиниці, тобто $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$. Випадок $\bar{b}_{12} = 0$ є виключним. Нехай $\bar{b}_{12} \neq 0$. Тоді система має вигляд

$$\begin{cases} y_1(k+1) = \lambda_1 y_1(k) + \bar{b}_{12} y_2(k-m) \\ y_2(k+1) = y_2(k), \end{cases} \quad k = 1, 2, \dots$$

Розв'язком другого рівняння буде, як і раніше

$$y_2(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_2(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0 \\ \bar{\varphi}_2(0), & \text{при } k = 1, 2, \dots \end{cases}$$

А розв'язок першого

$$y_1(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}_1(k), & k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \bar{\varphi}_1(0)\lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}_2(k-m-(j+1)) \right], & k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \bar{\varphi}_1(0)\lambda_1^k + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}_2(-j) \right] + \bar{b}_{12} \cdot k \bar{\varphi}_2(0), & k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

Сумуючи всі випадки, отримаємо наступне.

1. Якщо матриця A має комплексно-спряжені власні числа, то система зі слабким запізненням вироджується у систему без запізнення.
2. В усіх інших випадках розв'язок має вигляд

$$y(k) = \begin{cases} \bar{\varphi}(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \bar{\varphi}^*(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & \text{при } k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \Lambda^k \bar{\varphi}(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \bar{\varphi}^*(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \lambda_2^{k-m-(j+1)} \lambda_1^j \right] \bar{\varphi}^*(0), & \text{при } k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

Якщо зробити обернене перетворення, то, повертаючись до вихідних змінних, отримаємо

$$y(k) = \begin{cases} \varphi(k), & \text{при } k = -m, -m+1, \dots, 0; \\ \Lambda^k \varphi(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \varphi^*(k-m-(j+1)) \lambda_1^j \right], & \text{при } k = 1, 2, \dots, m+1; \\ \Lambda^k \varphi(0) + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^m \varphi^*(-j) \lambda_1^{k-(m+1)+j} \right] + \bar{b}_{12} \left[\sum_{j=0}^{k-1} \lambda_2^{k-m-(j+1)} \lambda_1^j \right] \varphi^*(0), & \text{при } k = m+2, m+3, \dots \end{cases}$$

твердження теореми.

Література

1. Хейл Дж. Теория функционально дифференциальных уравнений. – М., Мир, 1984. – 421 с.
2. Khusainov D.Ya., Benditkis D.B., Diblik J. Weak delay in system with aftereffect // Funct. Differ. Equ., V.9, 2002. – pp.385-404.
3. Bastinec J., Diblik J. One case of appearance of positive solutions of delayed discrete equations // Appl. Math., V.48, 2003. – pp.429-436.
4. Bastinec J., Diblik J. Subdominant positive solutions of the discrete equation $\Delta u(k+n) = -p(k)u(k)$ // Abstr. Appl. Anal. No.6, 2004. – pp.461-470.

Надійшла до редакції 15.12.2005

УДК 519.9

Тарас Я. Єлейко

**Апроксимація оптимальної
політики по зміні структури
капіталу при досягненні
компанією граничної межі
продаж**

У даній роботі, спираючись на марківську модель роботи компанії, було побудовано апроксимацію оптимальної політики управління структурою капіталу компанії при досягненні нею граничної межі продаж.

Ключові слова: оптимальна політика, структура капіталу, динамічне програмування.

Taras Y. Elejko

**Approximation of Optimal policy
of changing capital structure in
firm that reached the margin sales**

In this paper, laying on a Markov's model of company's work, was build the approximation of optimal policy of changing capital structure for firm that reached the margin sales.

Key Words: optimal policy, capital structure, dynamic programming.

E-mail: elej@bigmir.net

Кожна компанія з моменту свого утворення проходить декілька етапів розвитку. При цьому для успішних компаній обов'язково настає період, коли вони повністю займають свою нішу на ринку і їхні середні продажі стабілізуються на певному рівні. Очевидно, що в такому випадку немає жодного сенсу збільшувати виробничі активи фірми, оскільки вони не будуть задіяні у виробництві. Таким чином, перед керівництвом компанії постає питання, як саме розпоряджатись коштами, котрі до настання обмежень збуту йшли на збільшення виробничих активів фірми, тобто визначити як оптимально, з точки зору максимізації акціонерного капіталу компанії, розпоряджатись чистими прибутками фірми після настання певних обмежень ринку збуту.

Дослідження даного питання буде проведено за допомогою марківської моделі роботи компанії (надалі скорочено позначатимемо ММРК), котра є описана в роботах [1] та [2]. У даній статті ми розглянемо випадок повної стабілізації середньоочікуваних продаж компанії, починаючи з деякого періоду. Не обмежуючи загальності на основі центрального принципу динамічного програмування припустимо, що середньоочікувані продажі є незмінні протягом всього періоду діяльності компанії. Тобто, $M[S_1] = M[S_2] = \dots = M[S_n] = \dots$ де S_i - випадкова величина, котра визначає продажі протягом i -го періоду.

Згідно [1] продажі протягом i -го періоду рівні:

$$S_i = \xi(i)Ta_i \quad (1)$$

де Ta_i - розмір активів компанії в період i , а $\{\xi(i)\}_{i=1}^{\infty}$ - послідовність незалежних однаково розподілених випадкових величин.

Враховуючи (1) та припустивши, що середньоочікувані продажі стабілізувались на певному рівні одержуємо, що:

$$\forall i, j \in N: M[S_i] = M[S_j] = M[\xi(i)]Ta_i = M[\xi(j)]Ta_j \Rightarrow Ta_i = Ta_j \quad (2)$$

Іншими словами (2) означає, що активи компанії за умови повної стабілізації середньоочікуваних продаж є сталими. Для спрощення подальших розрахунків позначимо їх за $\bar{T}$.

За ММРК розподіл чистих прибутків компанії протягом i -го періоду $E(i)$ однозначно визначається розміром активів фірми та величиною її боргових зобов'язань по яких потрібно сплачувати проценти.

Оскільки,

$$Ta_i = T_i + Db_i \quad (3)$$

де T_i - величина власного капіталу в i -му періоді, а Db_i - величина запозиченого капіталу в i -му періоді, то враховуючи (1), (2) та (3) можемо стверджувати, що при сталому розмірі активів фірми розподіл її чистих прибутків протягом i -го періоду однозначно визначається розміром власного капіталу протягом цього періоду T_i . В ММРК дивіденди, виплачені компанією протягом i -го періоду, рівні:

$$Dv(i) = (1 - \alpha)E(i) \quad (4)$$

де α - частина чистих прибутків, котра пішла на погашення боргу компанії. Тут слід зазначити, що коли $T_i = \bar{T} \Rightarrow \alpha = 0$ а, отже, $Dv(i) = E(i)$.

Опишемо тепер критерій оптимальності, котрий ми будемо використовувати в нашому випадку. Для цього спочатку зазначимо, що вартість акціонерного капіталу компанії D визначається як сума всіх дивідендів, виплачених компанією протягом своєї діяльності:

$$D = \sum_{i=1}^{v-1} \frac{Dv(i)}{(1+r)^i} \quad (5)$$

$Dv(i)$ - дивіденди компанії, виплачені протягом i -гого періоду $i = \overline{1..v}$, v - період банкрутства компанії, а r - ставка дисконтування.

Оскільки $Dv(i)$ є випадковими величинами, то і D обчислене за формулою (5) буде випадковою величиною, знайти максимум якої не є

можливим. У зв'язку з цим оптимальною політикою управління чистими прибутками компанії ми будемо вважати таку політику, котра максимізує середньоочікувану вартість акціонерного капіталу компанії: $M[D]$, де $M[.]$ - оператор математичного сподівання.

Отже, управління на кожному кроці буде зводитись до визначення частини отриманого чистого прибутку, яку потрібно виплатити у вигляді дивідендів, а отже з (4) і частини чистого прибутку, яка піде на погашення займів у залежності від власного капіталу фірми протягом даного періоду T_i та розміру чистого прибутку, одержаного протягом цього періоду $E(i)$.

Позначимо стан компанії в i -тий період за $x_i = \langle T_i, E(i) \rangle$, а множину всеможливих значень керувань системою, що перебуває в стані x , позначимо за $A_{i+1}(x)$. Нехай $A_{i+1} = \bigcup_{x \in X_i} A_{i+1}(x)$, а X_i - множина станів, в котрих може знаходитись наша компанія в період i . Отже, визначимо тепер просту стратегію:

Означення. Відображення $\varphi_i : X_i \rightarrow A_{i+1}$ називається простою стратегією на кроці i , якщо $\forall x \in X_i \quad \varphi_i(x) \in A_{i+1}(x)$.

Застосовуючи на i -тому кроці просту стратегію визначену відображенням φ_i , ми отримаємо загальну стратегію (політику) управління чистими прибутками компанії π , котру умовно для нашої фірми можна зобразити наступним чином $\pi = \varphi_0 \varphi_1 \varphi_2 \dots \varphi_n \dots$. Позначимо за $D(x_0, \pi)$ середньоочікувану величину акціонерного капіталу компанії за використання політики π та початковим станом x_0 .

Будемо вважати, що політика $\bar{\pi}$ є оптимальною, якщо для довільної політики π та довільного початкового стану x_0 : $D(x_0, \bar{\pi}) \geq D(x_0, \pi)$. І позначатимемо максимально можливу середньоочікувану вартість акціонерного капіталу компанії при початку керування із стану x_0 за $D(x_0) = D(x_0, \bar{\pi})$. Таким чином, перед нами постає завдання відшукати оптимальну політику $\bar{\pi}$ для ММРК при повному обмеженні збуту.

У нашому випадку $X_0 = X_1 = \dots X_n = \dots$ і $A_1 = A_2 = \dots A_n = \dots$. Отже, ми будемо мати справу з так званим однорідним керованим марківським процесом з дисконтуванням. Оскільки виробничі активи фірми є обмеженими, то природно припустити, $\exists M : \forall i \quad E(i) < M$. За

формулою (5) отримуємо, що $D = \sum_{i=1}^{v-1} \frac{Dv(i)}{(1+r)^i} \leq \sum_{i=1}^{\infty} \frac{M}{(1+r)^i} = M \frac{1+r}{r}$.

Таким чином, можемо бачити, що, за довільної політики управління чистими прибутками, вартість акціонерного капіталу компанії є обмеженою. Враховуючи це та однорідність даної моделі, можемо стверджувати, що в нашому випадку існує оптимальна стаціонарна політика $\bar{\pi} = \varphi\varphi\varphi\dots\varphi\dots$ управління чистими прибутками компанії. Просту стратегію φ можна знайти з наступного фундаментального рівняння, розв'язавши його відносно α для кожного $x \in X_0$:

$$D(x) = D(\langle T, E \rangle) = \sup_{0 \leq \alpha \leq 1} [E(1-\alpha) + \frac{1}{1+r} M(D \langle T + E\alpha, E(T + E\alpha) \rangle / nb.) (1 - L(T + \alpha E))] =$$

$$= E(1 - \varphi(x)) + \frac{1}{1+r} M(D \langle T + E\varphi(x), E(T + E\varphi(x)) \rangle) (1 - L(T + \varphi(x)E)) \quad (6)$$

де $E(T + E\alpha)$ - випадкова величина, що описує розподіл чистих прибутків компанії із власними активами в розмірі $T + E\alpha$, за умови, що компанія не стала банкрутом, $M[\cdot / nb.]$ - умовне математичне сподівання. Подія $nb.$ - означає, що компанія не є банкрутом протягом відповідного досліджуваного періоду, а $L(T)$ - ймовірність банкрутства компанії при повному обмеженні збуту, за умови, що власні активи компанії рівні T . Оскільки розв'язок в аналітичному вигляді рівняння (6) відносно α є досить проблематичним, тому в нашій статті ми обмежимось відшукуванням так званої ε - оптимальної стратегії, тобто стратегії π_ε такої що: $|D(x) - D(x, \pi_\varepsilon)| < \varepsilon$ для $\forall x \in X_0$. Зауважимо, що $D(x)$ є не що інше як середньоочікувана вартість акціонерного капіталу компанії за умови оптимального керування на проміжку часу $t=0.\infty$. Розглянемо тепер звуження нашої ММРК на проміжок часу $t=n.m (n < m)$ і назначимо в момент часу $t=m$ фінальну плату, котра визначатиметься функцією $r_m: X_m \rightarrow R$. у такому випадку вартість акціонерного капіталу для компанії, котра буде описуватись даним звуженням ММРК при використанні оптимальної політики керування на даному проміжку, $t=n.m (n < m)$ можна визначити як функцію: $D_n^m[r_m]: X_n \rightarrow R$.

За даних позначень основний принцип динамічного програмування матиме наступним вигляд: $\forall m \in N \quad D(x) = D_0^m[D_m^0[0]](x)$. Враховуючи основний принцип динамічного програмування та обмеженість розміру

дивідендів виплачених протягом 1-го періоду, доволі легко довести наступне твердження.

Твердження 1. $\forall \varepsilon > 0 \exists N(\varepsilon): \forall x \in X_0 \forall m \geq N(\varepsilon) |D(x) - D_0^m[0](x)| < \varepsilon$.

Таким чином, враховуючи Твердження 1 для побудови ε -оптимальної стратегії управління фірмою за повного обмеження продаж, нам достатньо буде побудувати оптимальну стратегію управління чистими прибутками компанії для скінченного періоду керування $t = 0..N(\varepsilon)$ із нульовою фінальною платою, а після закінчення цього періоду ми можемо використовувати довільну стратегію. Побудуємо тепер оптимальну стратегію управління для періоду $t = 0..N(\varepsilon)$. Для цього ми використаємо основний принцип динамічного програмування та фундаментальне рівняння. Оскільки фінальна плата рівна 0, то:

$$D_{N(\varepsilon)}^{N(\varepsilon)}(<T, E>) = \sup_{0 \leq \alpha \leq 1} [E(1-\alpha)] = E \Rightarrow \varphi_{N(\varepsilon)}(<T, E>) = 0$$

Обчислимо далі $D_{N(\varepsilon)-1}^{N(\varepsilon)}$ та $\varphi_{N(\varepsilon)-1}$:

$$D_{N(\varepsilon)-1}^{N(\varepsilon)}(<T, E>) = \sup_{0 \leq \alpha \leq 1} [E(1-\alpha) + \frac{1}{1+r} M(D_{N(\varepsilon)}^{N(\varepsilon)}(<T+E\alpha, E(T+E\alpha)> / nh)(1-L(T+\alpha E))] \Rightarrow \\ \Rightarrow \varphi_{N(\varepsilon)-1}(<T, E>) = \alpha \quad (7)$$

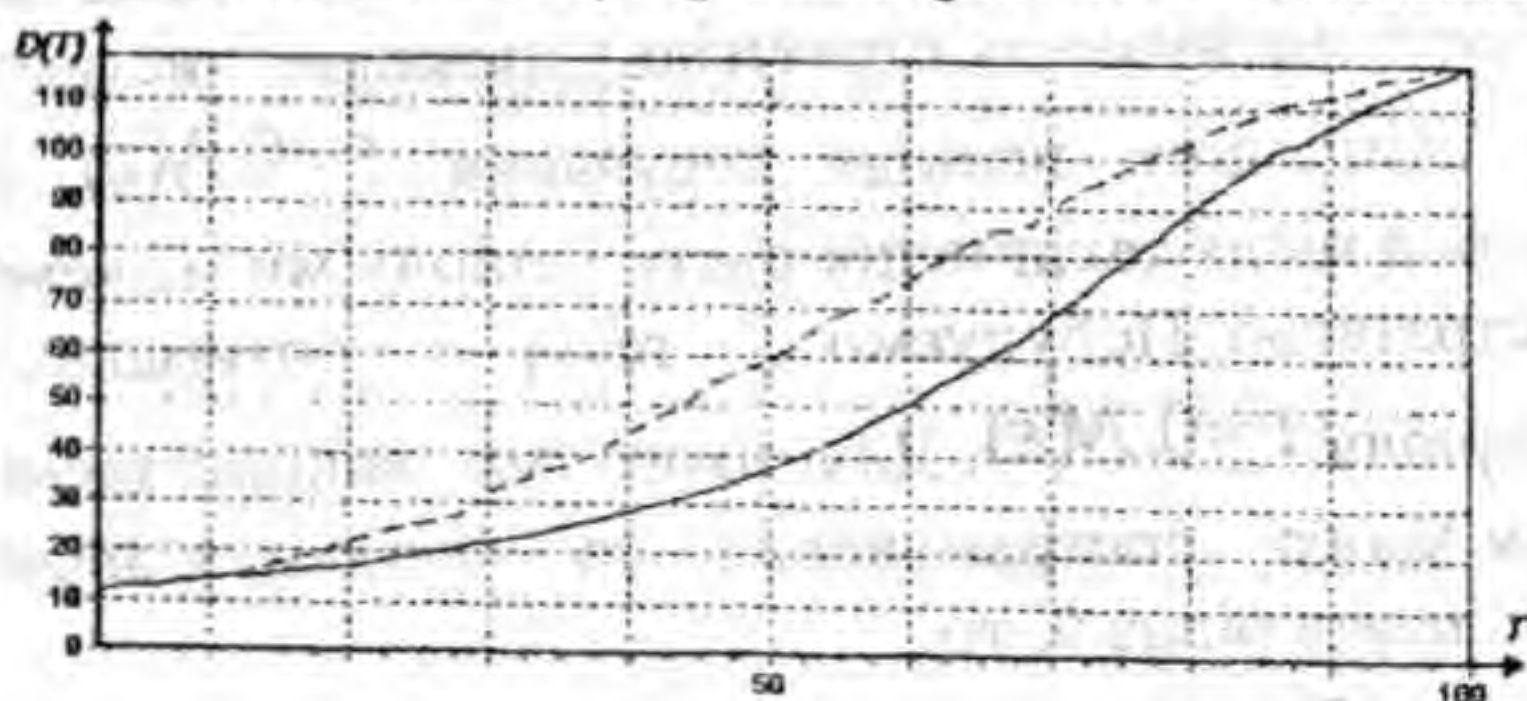
Продовжуючи далі по аналогії з (7), можна отримати $D_{N(\varepsilon)-2}^{N(\varepsilon)}, \dots, D_0^{N(\varepsilon)}$, а також $\varphi_{N(\varepsilon)-2}, \dots, \varphi_0$.

Отже, оптимальна політика $\pi_{N(\varepsilon)}$ на скінченому періоді управління $t = 0..N(\varepsilon)$ буде мати наступний вигляд: $\pi_{N(\varepsilon)} = \varphi_0 \dots \varphi_{N(\varepsilon)}$. Таким чином, ε -оптимальна стратегія управління компанією матиме вигляд $\pi_\varepsilon = \varphi_0 \dots \varphi_{N(\varepsilon)} \pi$, де π - довільна стратегія. Слід зазначити, що практичне використання політики $\pi_\varepsilon = \varphi_0 \dots \varphi_{N(\varepsilon)} \pi$ є доволі проблематичним. Зважаючи на це, сиробуємо дещо спростити вигляд нашої ε -оптимальної стратегії $\pi_\varepsilon = \varphi_0 \dots \varphi_{N(\varepsilon)} \pi$.

Теорема 1. Нехай $\varepsilon > 0$, і стратегія $\pi_{N(\frac{\varepsilon}{2})} = \varphi_0 \dots \varphi_{N(\frac{\varepsilon}{2})}$ - побудована за алгоритмом описаним вище. То тоді стратегія $\pi_\varepsilon^1 = \varphi_0 \varphi_0 \dots \varphi_0 = \varphi_0^\infty$ буде ε -оптимальною. Іншими словами, використовуючи на кожному кроці просту стратегію φ_0 , ми одержимо в загальному ε -оптимальну політику.

Приклад: Побудуємо для конкретного випадку стаціонарну ε -оптимальну стратегію та дослідимо, якою буде середньоочікувана вартість акціонерного капіталу компанії при її застосуванні. Дану стратегію ми побудуємо для компанії, чії параметри описані в [2], взявши $\bar{T} = 100$.

На графіку пунктирною лінією зображено середньоочікувану вартість акціонерного капіталу компанії в залежності від її стартового власного капіталу при використанні оптимальної стратегії та цілою лінією-



середньоочікувану вартість акціонерного капіталу компанії при застосуванні найпростішої стратегії, описаної в [2] (коли всі прибутки виплачуються у вигляді дивідендів).

Література

1. Наконечний О.М., Єлейко Т.А. Дослідження залежності середньоочікуваної вартості акцій від структури капіталу компанії// Доповіді НАН України. – 2005. - 1. – с.65-70.
2. Єлейко Т.Я. Оптимальна політика зміни структури капіталу при досягненні компанією граничної межі продаж// Доповіді НАН України. – 2005. - 4. – с.59-64.
3. Дынкин Е.Б., Юшкевич А.А. Управляемые марковские процессы и их приложения. – Москва:Наука, 1975.
4. Ross S.A., Westerfield R.W., Jordan B.D. Fundamentals of Corporate Finance (Fifth Edition). – Toronto: McGraw-Hill, 2001.

Надійшла до редакції 21.03.2006

УДК 681.3

Ігор О. Завадський¹,
Олександр В. Дерев'янченко

Igor O. Zavadskiy¹,
Oleksandr V. Derevyanchenko

До питання про часову оптимізацію паралельних програм

On time optimization of parallel programs

Запропоновано евристичний метод оптимізації розподілу обчислювачів за вершинами схеми потоку керування для паралельної програми.

The heuristic method of processors distribution by the nodes of the control flow scheme is proposed.

Ключові слова: схема потоку керування, паралелізм.

Key Words: control flow scheme, parallelism.

¹ E-mail: zava@unicyb.kiev.ua

¹ E-mail: zava@unicyb.kiev.ua

Широко відомий спосіб зображення паралельної програми як сукупності схеми потоку даних та схеми потоку керування [1]. Схема потоку даних визначає оператори програми та змінні, що ними використовується, а схема потоку керування, на якій ми зосередимо увагу, визначає частковий порядок виконання операторів. Ця схема є орграфом, вершини якого позначають оператори, а дуги задають порядок їх виконання. У даній роботі розглядаються лише безконтурні орграфи, тобто всі цикли вважаємо неподільними алгоритмічними модулями і позначаємо вершинами. Вважатимемо, що є обмежена кількість обчислювачів різної потужності (можливо, їх значно менше, ніж необхідно для максимального використання паралелізму). Кожен оператор, або алгоритмічний модуль, характеризується часовою складністю обчислення і вважається атомарним, тобто таким, що може бути обчислений лише на одному обчислювачі. Постає задача пошуку такого розподілу обчислювачів за вершинами, щоб загальний час виконання програми був якомога меншим. У загальному випадку ефективний (тобто, поліноміальний) алгоритм пошуку оптимального розподілу невідомий [2]–[3]. Ми пропонуємо евристичний алгоритм, що базується на принципі навантаження найпотужнішого обчислювача вершиною, яка є початком шляху найбільшої ваги, а також удосконалення цього алгоритму. Отже, формалізуємо постановку задачі й алгоритм.

Нехай заданий безконтурний орграф D , A — його вершинна база (множина вершин, в які не входить жодної дуги), а B — множина вершин, з яких не виходить жодної дуги.

Кожній вершині D зіставлене натуральне число d_i — її вага, або складність обчислення i -го алгоритмічного модулю. Одиничну складність обчислення алгоритмічного модулю називатимемо *найменшою обчислювальною одиницею* (НОО). Вагою шляху, що складається з вершин $i_1, \dots, i_k$, назвемо величину $d_{i_1} + \dots + d_{i_k}$. Складністю вершини i називатимемо вагу найважчого шляху з i до деякої вершини з B і позначатимемо цю величину як v_i , а сам такий шлях позначатимемо як h_i .

Нехай є обчислювачі $1, \dots, m$, що впорядковані за потужністю за спаданням. Потужністю обчислювача вважатимемо невід'ємне число p_i , що дорівнює кількості НОО, які обчислювач може обчислити за 1 найменший часовий відрізок (1 такт). Необхідно так розподілити обчислювачі за вершинами, щоб загальний час обробки орграфу був якомога меншим.

Базовий алгоритм

У кожен момент часу в орграфі є множина M вершин, обробку яких можна розпочати. Спочатку множина M є вершинною базою орграфа, а всі обчислювачі — вільними.

1) Якщо у графі є принаймні одна не обчислена вершина, виконуємо кроки 2–8, інакше — зупиняємось.

2) Якщо множина M не є порожньою, виконуємо кроки 3 і 4, інакше — крок 5.

3) Обчислюємо складності вершин, що належать M , і впорядковуємо їх за складністю за спаданням (отримуємо послідовність вершин $i_1, \dots, i_k$). Якщо складності кількох вершин є однаковими, то менший номер отримує та, вага якої є більшою.

4) Розглядаємо впорядковану за потужністю й за спаданням послідовність вільних обчислювачів. j -му обчислювачу призначаємо вершину i_j . Можливо, в M залишаться вершини без обчислювачів. Також можуть обчислювачі залишитися без вершин. Призначені обчислювачам вершини видаляємо з множини M , а відповідні обчислювачі вважаємо зайнятими.

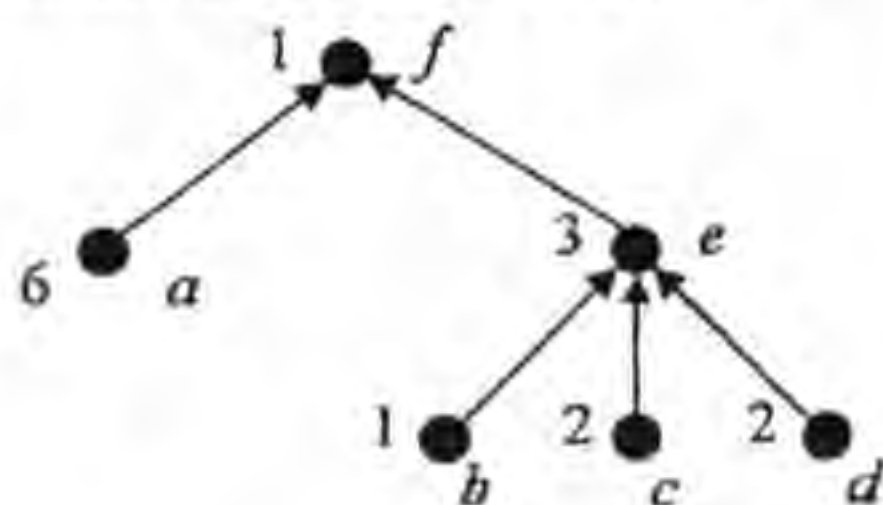
5) Виконуємо 1 такт обчислень: від ваги кожної призначеної обчислювачу j вершини i_j віднімаємо величину p_j (тобто вважаємо, що j -й обчислювач обробляє вершину i_j , в результаті чого зменшується її вага).

6) Крок 5 повторюємо доти, доки вага всіх призначених обчислювачам вершин залишається додатною.

7) Якщо вага певної вершини або ваги кількох вершин, що обробляються, набули недодатних значень, призначені ним обчислювачі вважаємо вільними, самі вершини — обчисленими, а також визначаємо множину M . До неї належатимуть всі такі не обчислені вершини, обробка яких у даний момент не здійснюється, та до яких не веде жодної дуги від не обчислених вершин.

8) Переходимо до кроку 1.

Зазначимо, що базовий алгоритм не завжди є оптимальним. Наприклад, розглянемо оргграф, зображений на рис. 1. Цифрами в ньому позначені ваги вершин, а літерами — їх імена. Вважаємо, що є два обчислювача, причому $p_1 = p_2 = 1$. Процес обробки цього графа за базовим алгоритмом описаний у табл. 1.



Такт	Обчислювач 1	Обчислювач 2
1	<i>a</i>	<i>c</i>
2	<i>a</i>	<i>c</i>
3	<i>a</i>	<i>d</i>
4	<i>a</i>	<i>d</i>
5	<i>a</i>	<i>b</i>
6	<i>a</i>	<i>e</i>
7		<i>e</i>
8		<i>e</i>
9	<i>f</i>	

Рис. 1. Приклад графа, для якого базовий алгоритм не є оптимальним.

Табл. 1. Обробка графа, зображеного на рис. 1, за базовим алгоритмом.

Отже, базовий алгоритм виконується за 9 тактів, хоча даний граф можна обробити за 8 тактів (відповідний спосіб організації обчислень показано в табл. 2).

Поліпшимо базовий алгоритм, спираючись на таку ідею: час обробки графу буде тим меншим, чим „більш одночасно” завершать роботу всі обчислювачі. Тому якщо певному обчислювачу доводиться очікувати, поки виконають необхідний обсяг робіт інші обчислювачі, то „пристрій-передовик” має „допомогти” тим, які відстають, так, аби всі пристрої завершили роботу водночас (якщо це можливо).

Отже, вважаємо, що оргграф D розмічений згідно з базовим алгоритмом і для кожної вершини i відомий обчислювач s_i , який її обробляє, а також часи, коли він починає та завершує обробку даної вершини — $start_i$ та fin_i . Якщо вершина i не належить базі оргарфа, відомою буде також вершина, яку s_i обробив відразу перед тим, як розпочати роботу з i . Таку вершину позначатимемо через $\bar{i}$.

Якщо час початку обробки вершини i обчислювачем s_i більший за час завершення обробки ним вершини $\bar{i}$, то будемо казати, що даний обчислювач має у вершині i затримку $r_i = start_i - fin_{\bar{i}}$. Тепер розглянемо довільну дугу (k, i) . Величину $r_{(k,i)} = fin_k - fin_i$ називатимемо запізненням обчислювача s_k за дугою (k, i) . Якщо запізнення $r_{(k,i)}$ додатне, то це означає,

що обчислювач s_k не встигає обробити вершину k так, щоб у вершині i обчислення розпочались без затримок.

З означення затримки й запізнення випливає, що коли $r_i \geq 0$, то $r_i = \max_{k \in K_i} r_{(k,i)}$, де $K_i = \{k | (k,i) \in \text{дугою}\}$. Тобто, якщо у вершині i обчислювач s_i затримується на r_i тактів, то максимальне запізнення деякого обчислювача s_k за дугою (k,i) дорівнює r_i . Логічно припустити, що коли обчислювач s_i обробить замість обчислювача s_k якусь вершину, то величини r_i та $r_{(k,i)}$ стануть ближчими до нуля, а отже й загальний час обчислення, ймовірно, зменшиться.

Обробку якої саме вершини слід передавати від обчислювача s_k , що запізнюється, обчислювачу s_i , що вичікує? Розглянемо послідовність вершин $j_1, \dots, j_m$, які виконує обчислювач s_k . У кожен момент часу t до обробки готова певна (можливо, нульова) кількість таких вершин, позначимо її c_t . Якщо заміну проводити тоді, коли $c_t = 1$, то незрозуміло, що буде робити s_k в той час, коли одну з призначених йому вершин оброблятиме інший обчислювач: якщо він буде просто вичікувати, то заміна стає недоцільною, а якщо його зайняти обробкою інших вершин, то це призведе до загального перерозподілу обчислювачів з важко передбачуваними наслідками. Натомість „безболісно” можна провести заміну тоді, коли $c_t > 1$, адже тоді s_k та s_i оброблятимуть дві вершини паралельно і час роботи s_k скоротиться, а час роботи s_i збільшиться. Отже, формалізуємо описаний підхід до вдосконалення базового алгоритму.

Доповнення до базового алгоритму

Спочатку застосовуємо базовий алгоритм, отримуючи для кожної вершини i номер її обчислювача s_i , час початку обчислень $start_i$ та час завершення обчислень fin_i .

1) Для всіх вершин обчислюємо затримки $r_i = start_i - fin_i$.
2) Всі вершини з нульовими затримками помічаємо. Поки є непомічені вершини, виконуємо кроки 3–7.

3) Беремо довільну непомічену вершину i , таку, що всі шляхи, які в ній завершуються, не містять інших непомічених вершин. Помічаємо вершину i . Для всіх дуг, що завершуються у вершині i обчислюємо запізнення $r_{(k,i)} = fin_k - fin_i$. Нехай (k,i) — така дуга, що $r_{(k,i)} = r_i$. Розглядаємо послідовність вершин $j_1, \dots, j_m$, які обробляє обчислювач s_k , причому $j_m = k$. Для кожного моменту часу, від 0 до $start_k$, визначаємо набір тих вершин із даної послідовності, які готові до обробки (всі суміжні з ними вершини вже обчислені).

4) Розглядаємо лише ті моменти часу від 0 до $start_k$, коли s_i вільний та для обробки готові більше однієї вершини з послідовності $j_1, \dots, j_m$. Обчислювач s_i вважаємо вільним в ті моменти, в які він або розпочинає обробку певної вершини, або перебуває в стані очікування.

5) Нехай в момент часу t до обробки обчислювачем s_k готові вершини $j_1, \dots, j_n$. Призначаємо по черзі зазначені вершини обчислювачу s_i , перераховуючи після цього величину r_i .

6) Якщо під час виконання кроків 4 та 5 величина r_i хоча б один раз зменшувалась, вважаємо дійсною заміну обчислювача, яка привела до мінімізації r_i .

7) Переходимо до кроку 2.

У таблиці 2 проілюстровано застосування до графу, зображеного на рис. 1, доповнення до базового алгоритму.

рис. 1, доповнення до базового алгоритму.

Базовий алгоритм					Заміна обчислювача для вершини b на нульовому такті		
Такт	Обчислювач 1		Обчислювач 2		Вершини, готові до обробки обчислювачем 2	Обчислювач 1	Обчислювач 2
	вершина, i	r_i	вершина, i	r_i			
0					b, c, d		
1	a	0	c	0	b, d	b	c
2	a		c		b, d	a	c
3	a		d	0	b	a	d
4	a		d		b	a	d
5	a		b	0		a	e
6	a		e	0		a	e
7			e			a	e
8			e			f	
9	f	2, $r_{(e,f)}=2$					

1. з доповненням до

Табл. 2. Обробка графа, зображеного на рис. 1, за доповненням до базового алгоритму.

Зазначимо, що доповнення до базового алгоритму буде тим ефективнішим, чим вищою буде степінь паралелізму схеми потоку керування.

Література

1. Системы параллельной обработки. Под ред. Д. Ивенса, М., Мир, 1985, 416 с.
2. Белицкий Р.И., Логинов В.П. Выбор алгоритма диспетчеризации для мультипроцессорной системы с общей шиной // Управляющие системы и машины. – 1991. – №1. – с. 9-13.
3. Головкин Б.А. Расчет характеристик и планирование параллельных вычислительных процессов. — М., Радио и связь, 1983. – 272 с.

Надійшла до редакції 23.12.2005

УДК 518.61

Петро М. Зінко¹

Неявна різницева схема для розв'язування неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами

На прикладі одновимірної крайової задачі параболічного типу зі змінними коефіцієнтами пропонується новий числовий алгоритм знаходження наближеного розв'язку за неявною схемою, який базується на теорії розв'язуючих операторів.

Ключові слова: крайова задача, числові алгоритми, наближений розв'язок.

¹ E-mail: Zinko@unicyb.kiev.ua

Petro M. Zinko¹

Construction of the implicit difference schemes for the heat conduction equation with varied factors

On an example of the one-dimensional boundary value problems of parabolic type with varied factors we construct the new numerical algorithms of the approximate solution based on the theory of solving operators.

Key Words: boundary value problem, numerical algorithms, approximate solution.

В роботі [1] запропоновані нові числові алгоритми знаходження наближеного розв'язку неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами за явними різницеви́ми схемами. В роботі [2] були побудовані числові алгоритми наближеного розв'язування крайових задач параболічного типу з постійними коефіцієнтами за неявними схемами. В даній статті будуються нові неявні різницеві схеми для знаходження наближеного розв'язку крайової задачі параболічного типу зі змінними коефіцієнтами, які ґрунтуються на теорії розв'язуючих операторів.

Розглядаємо одновимірну першу крайову задачу параболічного типу [3]:

знайти в прямокутнику $\bar{D} = (0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T)$ розв'язок $u(x, t)$ рівняння

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) + \varphi(x, t), \quad (1)$$

який задовільняє початковій умові

$$u(x, 0) = \mu(x), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (2)$$

і крайовим умовам

$$u(0, t) = \eta_1(t), \quad u(1, t) = \eta_2(t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (3)$$

Коефіцієнт теплопровідності $k(x)$ обмежений знизу і зверху, відповідно константами c_1 і c_2

$$0 < c_1 \leq k(x) \leq c_2 < \infty, \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (4)$$

Будемо вважати, що задача (1) - (4) має єдиний розв'язок, а також, що існують необхідні для подальших викладок похідні від функцій $u(x, t)$ і $k(x)$.

Введемо на відрізку $0 \leq x \leq 1$ сітку ω_Δ із вибраним кроком $\Delta > 0$:

$$\omega_\Delta = \{x_i = i \cdot \Delta, i = 0, 1, \dots, N, \Delta = 1/N\}.$$

Спочатку запишемо перший доданок правої частини у рівнянні (1) в такому вигляді

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) = k(x) \cdot \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} + \frac{dk(x)}{dx} \cdot \frac{\partial u(x, t)}{\partial x}. \quad (5)$$

Тепер, якщо розкласти функцію $k(x)$ в ряд Тейлора з точністю до $O(\Delta^4)$, то отримаємо наступне представлення для похідної

$$\frac{dk(x)}{dx} = \frac{1}{2\Delta} (k(x + \Delta) - k(x - \Delta)) + O(\Delta^2). \quad (6)$$

Використаємо відомі формули апроксимації першої та другої похідних по x функції $u(x, t)$ [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} &= (u(x + \Delta, t) - u(x - \Delta, t)) / (2\Delta) + O(\Delta^2), \\ \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} &= (u(x + \Delta, t) - 2u(x, t) + u(x - \Delta, t)) / \Delta^2 + O(\Delta^2). \end{aligned} \quad (7)$$

Формула (5) з врахуванням співвідношень (6), (7) набуде такого вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(k(x) \cdot \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) &= \frac{1}{\Delta^2} \left[\left(k(x) - \frac{k(x + \Delta) - k(x - \Delta)}{4} \right) u(x - \Delta, t) - 2k(x)u(x, t) + \right. \\ &\quad \left. + \left(k(x) + \frac{k(x + \Delta) - k(x - \Delta)}{4} \right) u(x + \Delta, t) \right] + O(\Delta^2). \end{aligned} \quad (8)$$

Ввівши на сітці ω_Δ позначення $u(x_i, t) = u_i(t)$, $k(x_i) = k_i$, $\bar{\psi}_i(t) = \varphi(x_i, t)$, $i = 0, 1, \dots, N$, перейдемо від рівняння в частинних похідних (1) до наступної системи звичайних диференціальних рівнянь відносно невідомих функцій $u_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, N - 1$:

$$\frac{du_i(t)}{dt} = -\frac{2k_i}{\Delta^2}u_i(t) + \frac{1}{\Delta^2}\left(k_i - \frac{k_{i+1} - k_{i-1}}{4}\right)u_{i-1}(t) + \frac{1}{\Delta^2}\left(k_i + \frac{k_{i+1} - k_{i-1}}{4}\right)u_{i+1}(t) + \bar{\psi}_i(t), \quad i=1, 2, \dots, N-1. \quad (9)$$

Введемо в системі (9) позначення

$$V_i = (k_{i+1} - k_{i-1})/4, \quad i=1, 2, \dots, N-1,$$

$$\psi_i(t) = \bar{\psi}_i(t), \quad i=2, 3, \dots, N-2,$$

$$\psi_1(t) = \bar{\psi}_1(t) + (k_1 - V_1)\eta_1(t),$$

$$\psi_{N-1}(t) = \bar{\psi}_{N-1}(t) + (k_{N-1} + V_{N-1})\eta_2(t)$$

і отримаємо наступну задачу Коші

$$\begin{cases} \frac{du_1(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta^2}[-2k_1u_1(t) + (k_1 + V_1)u_2(t)] + \psi_1(t), \\ \frac{du_2(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta^2}[(k_2 - V_2)u_1(t) - 2k_2u_2(t) + (k_2 + V_2)u_3(t)] + \psi_2(t), \\ \dots \\ \frac{du_i(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta^2}[(k_i - V_i)u_{i-1}(t) - 2k_iu_i(t) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t)] + \psi_i(t), \\ \dots \\ \frac{du_{N-2}(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta^2}[(k_{N-2} - V_{N-2})u_{N-3}(t) - 2k_{N-2}u_{N-2}(t) + (k_{N-2} + V_{N-2})u_{N-1}(t)] + \psi_{N-2}(t), \\ \frac{du_{N-1}(t)}{dt} = \frac{1}{\Delta^2}[(k_{N-1} - V_{N-1})u_{N-2}(t) - 2k_{N-1}u_{N-1}(t)] + \psi_{N-1}(t), \\ u_i(0) = \mu(x_i), \quad i=1, 2, \dots, N-1, \end{cases} \quad (10)$$

яка у векторній формі може бути записана в такому вигляді

$$\frac{du(t)}{dt} = f(u(t), t), \quad u(0) = (\mu(x_1), \mu(x_2), \dots, \mu(x_{N-1}))^{tr}, \quad (11)$$

де $u(t) = (u_1(t), u_2(t), \dots, u_{N-1}(t))^{tr}$, $f(u(t), t) = (f_1(u(t), t), f_2(u(t), t), \dots, f_{N-1}(u(t), t))^{tr}$, $f_i(u(t), t)$, $i=1, 2, \dots, N-1$, дорівнює правій частині i -го рівняння в (10), а tr – знак транспонування.

Для розв'язування системи (11) скористаємося формулою наближеного обчислення розв'язку задачі Коші [4]:

$$u(t+h) = p(t+h) + \int_t^{t+h} [f(p(\tau), \tau) - dp(\tau)/d\tau] d\tau, \quad (12)$$

де $h>0$ – крок інтегрування, $p(\tau)$ – «прогнозна» функція. Якщо виберемо «прогнозну» функцію $p(\tau)$ у вигляді

$$p(\tau) = u(t) + (\tau - t)f(u(t), t) + O(h^2), \quad \tau \in [t - h; t + h], \quad (13)$$

тоді з (13) будемо мати

$$p(t + h) = u(t) + h \cdot f(u(t), t), \quad \frac{dp(\tau)}{d\tau} = f(u(t), t). \quad (14)$$

Підставивши (14) у формулу (12), одержимо

$$u(t + h) = u(t) + hf(u(t), t) + \int_t^{t+h} [f(p(\tau), \tau) - f(u(t), t)] d\tau. \quad (15)$$

Використавши в (15) формулу трапецій наближеного обчислення інтегралів (похибка якої $O(h^3)$), одержимо

$$u(t + h) = u(t) + \frac{h}{2} [f(u(t), t) + f(p(t + h), t + h)]. \quad (16)$$

Наближене значення $u(t + h)$ апроксимує розв'язок задачі Коші (11) в точці $t + h$ з похибкою $O(h^3)$.

Запишемо i -ту ($i = 1, 2, \dots, N - 1$) компоненту в (10) у такому вигляді

$$\begin{aligned} \frac{du_i(t)}{dt} &= \underbrace{-\frac{2k_i}{\Delta^2} u_i(t)}_{F_i^{(1)}(u_i(t))} + \underbrace{\frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t)] + \psi_i(t)}_{F_i^{(2)}(t)} = \\ &= F_i(u_i(t), t) = F_i^{(1)}(u_i(t)) + F_i^{(2)}(t) = f_i(u_i(t), t). \end{aligned} \quad (17)$$

З формул (16), (17) для i -ї компоненти випливає співвідношення

$$\begin{aligned} u_i(t + h) &= u_i(t) + \frac{h}{2} \{ F_i(p_i(t + h), t + h) + F_i(u_i(t), t) \} = \\ &= u_i(t) + \frac{h}{2} \left\{ -\frac{2k_i}{\Delta^2} u_i(t) + \frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t)] + \psi_i(t) - \right. \\ &\quad \left. -\frac{2k_i}{\Delta^2} [u_i(t) + hf_i(u(t), t)] + \frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t + h) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t + h)] + \psi_i(t + h) \right\} = \\ &= u_i(t) + \frac{h}{2} \left\{ -\frac{2k_i}{\Delta^2} u_i(t) + \frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t)] + \psi_i(t) - \right. \\ &\quad \left. -\frac{2k_i}{\Delta^2} \left[u_i(t) + h \left[-\frac{2k_i}{\Delta^2} u_i(t) + \frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t)] + \psi_i(t) \right] \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{\Delta^2} [(k_i - V_i)u_{i-1}(t + h) + (k_i + V_i)u_{i+1}(t + h)] + \psi_i(t + h) \right\}. \end{aligned}$$

Після зведення подібних членів отримаємо

$$\begin{aligned}
 & -\frac{h}{2\Delta^2}(k_i - V_i)u_{i-1}(t+h) + u_i(t+h) - \frac{h}{2\Delta^2}(k_i + V_i)u_{i+1}(t+h) = \\
 & = u_i(t) \left[1 - \frac{2h}{\Delta^2}k_i + \frac{h^2}{2} \left(\frac{2k_i}{\Delta^2} \right)^2 \right] + u_{i-1}(t) \left[\frac{h}{2\Delta^2}(k_i - V_i) - \left(\frac{h}{\Delta^2} \right)^2 k_i(k_i - V_i) \right] + \\
 & + u_{i+1}(t) \left[\frac{h}{2\Delta^2}(k_i + V_i) - \left(\frac{h}{\Delta^2} \right)^2 k_i(k_i + V_i) \right] + \frac{h}{2} \left[\left[1 - \frac{2k_i h}{\Delta^2} \right] \psi_i(t) + \psi_i(t+h) \right].
 \end{aligned} \quad (18)$$

Позначимо $h/(2\Delta^2) = \tau$, тоді (18) прийме вигляд

$$\begin{aligned}
 & -\tau(k_i - V_i)u_{i-1}(t+h) + u_i(t+h) - \tau(k_i + V_i)u_{i+1}(t+h) = \\
 & = u_i(t) [1 - 4k_i \cdot \tau + 8\tau^2 \cdot k_i^2] + u_{i-1}(t)(k_i - V_i) [\tau - 4\tau^2 k_i] + \\
 & + u_{i+1}(t)(k_i + V_i) [\tau - 4\tau^2 k_i] + \frac{h}{2} [(1 - 4k_i \tau) \psi_i(t) + \psi_i(t+h)].
 \end{aligned} \quad (19)$$

Праву частину рівності (19) позначимо через $\bar{g}_i$, $i=1, 2, \dots, N-1$; покладемо $y_i = u_i(t+h)$, $i=0, 1, \dots, N$ (причому із (3) випливають рівності $y_0 = \eta_1(t+h)$, $y_N = \eta_2(t+h)$); $g_i = \bar{g}_i$, $i=2, 3, \dots, N-2$; $g_1 = \bar{g}_1 + \tau(k_1 - V_1)y_0$; $g_{N-1} = \bar{g}_{N-1} + \tau(k_{N-1} + V_{N-1})y_N$, і таким чином приходимо до наступної системи лінійних алгебраїчних рівнянь (з трьохдіагональною матрицею) для знаходження наближеного розв'язку $y_1, y_2, \dots, y_{N-1}$ крайової задачі (1)–(3)

$$\begin{cases}
 y_1 - \beta_1 y_2 & = g_1, \\
 -\alpha_2 y_1 + y_2 - \beta_2 y_3 & = g_2, \\
 -\alpha_3 y_2 + y_3 - \beta_3 y_4 & = g_3, \\
 \vdots & \vdots \\
 -\alpha_{N-2} y_{N-3} + y_{N-2} - \beta_{N-2} y_{N-1} & = g_{N-2}, \\
 -\alpha_{N-1} y_{N-2} + y_{N-1} & = g_{N-1}.
 \end{cases} \quad (20)$$

Для розв'язування системи (20) можемо, наприклад, застосувати наступну класичну схему:

1) обчислюємо послідовності

$$\begin{aligned}
 a_i &= \frac{\beta_i}{1 - \alpha_i a_{i-1}}, & i=2, 3, \dots, N-2; & a_1 = \beta_1; \\
 b_i &= \frac{g_i + \alpha_i b_{i-1}}{1 - \alpha_i a_{i-1}}, & i=2, 3, \dots, N-2; & b_1 = g_1;
 \end{aligned}$$

2) обчислюємо значення y_{N-1} ,

$$y_{N-1} = \frac{g_{N-1} + \alpha_{N-1} b_{N-2}}{1 - \alpha_{N-1} a_{N-2}};$$

3) обчислюємо послідовність

$$y_i = b_i + a_i y_{i+1}, \quad i = N-2, N-3, \dots, 1.$$

Даний алгоритм випробуваний на тестовому прикладі

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left((x^2 + 1) \frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right) - 3x^2 - x(2t - 1)$$

з відомим аналітичним розв'язком

$$u(x, t) = t + tx + \frac{x^2}{2}.$$

За аналогічною схемою нами також побудовані чисельні алгоритми розв'язування крайових задач параболічного типу у двовимірному і трьохвимірному випадках.

Література

1. Зінько П.М. Побудова явних різницевих схем для неоднорідного рівняння теплопровідності зі змінними коефіцієнтами// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2005. - вип. 1. - С. 177-181.
2. Зінько П.М. Числові алгоритми побудови наближених розв'язків крайових задач за неявними схемами. Одновимірна задача// Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. - 2000. - вип. 3. - С. 233-238.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. - М.: Наука, 1983. - 616 с.
4. Бейко И.В., Зинько П.Н., Щур В.И. Методы разрешающих операторов для решения задачи Коши, использующие полиномы Лагранжа/ Киевский университет им. Т. Шевченко. - Киев, 1986. - 39с. - Рус. - Деп. в УКРНИИНТИ 22.06.86, №1468.

Надійшла до редколегії 10.02.2006 р.

УДК 519.852:519.876

Григорій І.Кудін

Керування лінійними дискретними системами при фазових обмеженнях

З використанням псевдообернених матриць побудовані розв'язки задачі керування лінійною дискретною системою з лінійними обмеженнями в проміжних точках.

Ключові слова: дискретні лінійні системи, крайові умови, фазові обмеження.

E-mail: kuding@mail.univ.kiev.ua

Grigoriy I. Kudin

Management by the linear discrete systems at phases limitations

With the use of pseudoinverse matrices the built upshots of task of management by the linear discrete system with linear limitations in intermediate points.

Keywords: discrete linear systems, regional terms phases limitations.

Дослідження питань існування, єдиності розв'язку, а також побудови самого розв'язку багатоточкових крайових задач – тема численних публікацій в математичних, механічних, загалом різних виданнях теоретичного і прикладного спрямування. Складність проблеми часто не знімається навіть для лінійних моделей.

В теорії крайових задач, в постановках прикладної механіки багатоточкова крайова задача для системи лінійних звичайних диференціальних рівнянь в умовах існування і єдиності розв'язку наближено розв'язується з використанням ЕОМ, а тому автоматично (завдяки використаному чисельному методу), чи попередніми способами дискретизації часу або простору фазових станів, зводиться до послідовності систем лінійних алгебраїчних рекурентних співвідношень. В точках дискретизації часу, простору фазових станів багатоточкової крайової задачі для отриманої системи лінійних алгебраїчних рекурентних співвідношень, як правило, згідно постановки вихідної задачі виникають додаткові фазові обмеження.

Значний інтерес до проблем побудови розв'язків крайових задач протягом останніх десятиліть пов'язується з досягненнями в галузі проектування і розробки систем керування, постановки задач їх розрахунку часто формулюються в дискретній постановці з обмеженнями як на керування, так і на фазовий стан системи.

В статті визначаються умови існування розв'язку задачі керування лінійною дискретною системою з лінійними фазовими обмеженнями в проміжних точках, а також за умов існування розв'язку будується і сам розв'язок задачі. Поставлена задача тематично і методично пов'язана з публікаціями [1-3].

1. Постановка задачі.

Нехай динамічна система керування з дискретним аргументом описується системою рівнянь

$$\mathbf{x}(k+1) = A(k)\mathbf{x}(k) + B(k)\mathbf{u}(k), \quad (1)$$

$$k = \overline{0, N-1},$$

де $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^{n \times 1}$ - вектор фазового стану системи керування,

$A(k) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - відома матриця системи,

$B(k) \in \mathbb{R}^{n \times m}$ - відома матриця керування,

$\mathbf{u}(k) \in \mathbb{R}^{m \times 1}$ - невідомий вектор керування.

Фазовий стан системи керування (1) може мати обмеження на кінцях інтервалу зміни аргументу, а також в деяких його внутрішніх точках, тобто:

$$Q_i^T \mathbf{x}(i) = q_i, \quad (2)$$

$$i = k_1 < k_2 < \dots < k_S,$$

$$k_j \in \overline{0, N}, \quad j \in \overline{1, S}, \quad S \leq N+1,$$

де $Q_i \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $q_i \in \mathbb{R}$.

Ставиться задача знаходження всієї множини розв'язків (псевдорозв'язків) задачі керування виду (1) - (2), тобто потрібно знайти невідомі вектори керування $\mathbf{u}(k) \in \mathbb{R}^{m \times 1}$, $k = \overline{0, N-1}$, невідомі вектори фазового стану системи керування $\mathbf{x}(k) \in \mathbb{R}^{n \times 1}$, $k = \overline{0, N}$ такі, щоб обмеження (2) для фазових станів були виконаними.

Поставлена задача в силу специфіки системи рівнянь (1) не може бути розв'язаною без знання вектора початкового фазового стану системи $\mathbf{x}(0)$.

Аналіз поставленої задачі керування (1) - (2) - важливий етап розв'язування інших можливих задач керування системами типу (1). Дійсно, по-перше, різноманітні, важливі для практичних застосувань, задачі включають фазові обмеження на початку або в кінці процесу керування, а часто і в проміжних точках інтервалу керування; по-друге, за умов існування та неєдуності розв'язку поставлених задач виникає можливість формувати додаткові функціонали на розв'язках системи (1) - (2). Більш широкі можливості відкриваються, якщо деякі параметри моделі (1) - (2) невизначені і тоді, при наявності явного вигляду множини розв'язків, з допомогою додаткових функціоналів знаходяться оптимальні значення цих параметрів - розв'язується задача синтезу системи керування.

Особливої уваги для задач прикладного спрямування заслуговують дослідження, які при відсутності розв'язків задач дають аналітичне представлення для псевдорозв'язків [3], а саме: згідно певних критеріїв типу

нев'язки для систем лінійних алгебраїчних рівнянь, норми розв'язків і т. п. формуються залежності, які не являються розв'язками, але при допустимих варіаціях параметрів математичної моделі можуть стати розв'язками. При розв'язуванні поставленої задачі будуть отримані формули, які за певних умов можуть розглядатись як псевдорозв'язки.

2. Необхідні і достатні умови існування розв'язку задачі.

Якщо для системи керування з дискретним аргументом (1) вважати вектор $x(0)$ відомим, то для фазового вектора в k_j -ій внутрішній точці має місце представлення

$$x(k_j) = X(k_j, 0)x(0) + \sum_{k=0}^{k_j-1} W(k_j, k)u(k), \quad (3)$$

$$k_j \in [0, N], \quad j = [\overline{1, S}], \quad S \leq N+1,$$

де

$$X(k_j, 0) = A(k_j - 1)A(k_j - 2) \dots A(0) \in R^{n \times n}, \quad (4)$$

$$X(0, 0) = E, \quad X(1, 0) = A(0),$$

$$W(k_j, k) = A(k_j - 1)A(k_j - 2) \dots A(k + 1)B(k) \in R^{n \times m}, \quad (5)$$

$$W(0, 0) = 0, \quad W(1, 0) = B(0),$$

$$W(k_j, k) = 0, \quad \text{якщо } k > k_j - 1,$$

а сумування при $k_1 = 0$ в формулі (3) $(\sum_{k=0}^{-1})$ розуміється, як $\sum_{k=0}^0$.

Цілі аргументи співмножників в формулах (4), (5) зростають зліва направо.

Враховуючи рівності (3), умови (2) можна представити так

$$Q_{k_j}^T (X(k_j, 0)x(0) + \sum_{k=0}^{k_j-1} W(k_j, k)u(k)) = q_{k_j}, \quad (6)$$

$$k_j \in [0, N], \quad j = [\overline{1, S}], \quad S \leq N+1,$$

а, якщо ввести новий вектор

$$u^T = (u^T(0) : u^T(1) : \dots : u^T(k_S - 1)) \in R^{1 \times k_S m} \quad (7)$$

та нові матриці

$$V(k_j) = (W(k_j, 0) : W(k_j, 1) : \dots : W(k_j, k_j - 1) : 0 : \dots : 0) \in R^{n \times m k_S}, \quad (8)$$

$$k_j \in [0, N], \quad j = [\overline{1, S}], \quad S \leq N+1,$$

де символ $:$ означає приєднання стовпчиків наступної матриці до

стовпчиків попередньої матриці, то одержимо еквівалентну задачі керування (1) - (2) таку матричну рівність:

$$C x(0) = q - Du, \quad (9)$$

де

$$C = \begin{pmatrix} Q_{k_1}^T X(k_1, 0) \\ \dots \\ Q_{k_S}^T X(k_S, 0) \end{pmatrix} \in R^{S \times n}, \quad D = \begin{pmatrix} Q_{k_1}^T V(k_1) \\ \dots \\ Q_{k_S}^T V(k_S) \end{pmatrix} \in R^{S \times k_S m}, \quad (10)$$

$$k_j \in [0, N], \quad j \in (\overline{1, S}), \quad S \leq N + 1$$

$$q^T = (q_{k_1}, q_{k_2}, \dots, q_{k_S}).$$

Необхідні і достатні умови існування розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь (9) відносно $x(0) \in R^{n \times 1}$, враховуючи результати роботи [2], можна записати так:

$$Z(C^T)(q - Du) = 0, \quad (11)$$

де проекційний оператор $Z(C^T) = I_S - CC^+$, який для випадку $S < mk_S$, доцільно обчислювати за формулою

$$Z(C^T) = I_S - (CC^T)(CC^T)^+, \quad (12)$$

$$(CC^T)_{ij} = (Q_{k_i}^T X(k_i, 0) X(k_j, 0) Q_{k_j}) \in R, \quad (13)$$

$$i, j \in (\overline{1, S}).$$

Тут $C^+ \in R^{n \times S}$ - матриця, псевдообернена до матриці $C \in R^{S \times n}$.

Співвідношення (10) можна переписати, виділивши вектор - параметр u :

$$Z(C^T)Du = Z(C^T)q, \quad (14)$$

що в результаті дає рівняння для невідомих векторів керування.

Виходячи з необхідних і достатніх умов існування розв'язку системи лінійних алгебраїчних рівнянь (13) відносно $u \in R^{k_S m \times 1}$, має місце співвідношення.

$$Z((Z(C^T)D)^T) Z(C^T)q = 0, \quad (15)$$

яке можна переписати по-іншому, а саме:

$$Z(C^T) Z(D^T) Z(C^T)q = 0. \quad (16)$$

Таким чином, має місце

Теорема 1.

Для існування розв'язку задачі термінального керування для лінійних систем з дискретним аргументом при фазових обмеженнях (1) - (2) необхідно і достатньо, щоб при виконанні умови (16) мала місце рівність (11), де $u \in R^{k_s \times 1}$ - один з розв'язків системи (14).

3. Розв'язки задачі керування лінійною системою з крайовими умовами і фазовими обмеженнями.

При виконанні умов теореми 1 система лінійних алгебраїчних рівнянь (9) має розв'язок (множину розв'язків), тобто справедливе представлення [2]

$$\begin{aligned} x(0) &= C^+ (q - Du) + Z(C)\omega, \\ \omega &\in R^{n \times 1}, \end{aligned} \quad (17)$$

де $Z(C) = I_n - C^+ C$, а вектор керування $u \in R^{k_s \times 1}$ - розв'язок системи лінійних алгебраїчних рівнянь (14)

$$\begin{aligned} u &= (Z(C^T)D)^+ Z(C^T)q + Z(Z(C^T)D)v, \\ \forall v &\in R^{k_s \times 1}. \end{aligned} \quad (18)$$

Формула (18) може бути переписана більш просто:

$$\begin{aligned} u &= D^+ Z(C^T)(q - Dv) + v, \\ \forall v &\in R^{k_s \times 1}. \end{aligned} \quad (19)$$

Відповідно, вираз для вектора початкових умов $x(0)$ (формула (17)) матиме вид:

$$\begin{aligned} x(0) &= C^+ (q - D(D^+ Z(C^T)(q - Dv) + v)) + Z(C)\omega = \\ &= C^+ (I_s - Z(D^T)Z(C^T))(q - Dv) + Z(C)\omega, \\ \forall v &\in R^{k_s \times 1}, \quad \omega \in R^{n \times 1}. \end{aligned} \quad (20)$$

Теорема 2. Якщо виконуються необхідні і достатні умови існування розв'язку задачі керування лінійними системами з крайовими умовами (1) - (2) (умови теореми 1), то розв'язки вихідної задачі (1) - (2) визначаються формулами (19), (20), в яких вектори ω та v - довільні вектори відповідних просторів.

Для подальшого використання формули (19) в практичних застосуваннях доцільно в явному вигляді представити вектор - компоненти $u(k) \in R^{m \times 1}$, $k = [0, k_s - 1]$ вектора керування $u \in R^{k_s \times 1}$ (подати формули для керування системою в точках дискретизації). Це досягається використанням таких представлень та тотожностей:

$$D^+ = D^T (DD^T)^+, \quad (21)$$

$$(DD^T)_{ij} = (Q_{k_i}^T V(k_i) V^T(k_j) Q_{k_j}) \in R, \quad (22)$$

$$i, j = \overline{1, S}.$$

$$D^T = (V^T(k_1) Q_{k_1} : V^T(k_2) Q_{k_2} : \dots : V^T(k_S) Q_{k_S}) = \begin{pmatrix} D_{(0)}^T \\ \dots \\ D_{(k_S-1)}^T \end{pmatrix} \in R^{k_S m \times S}, \quad (23)$$

$$D_{(k)}^T = (W^T(k_1, k) Q_{k_1} : W^T(k_2, k) Q_{k_2} : \dots : W^T(k_S, k) Q_{k_S}),$$

$$k = \overline{(0, k_S - 1)}.$$

Отже, вектори керування $u(k) \in R^{m \times 1}$, $k = \overline{0, k_S - 1}$ записуються так:

$$u(k) = D_{(k)}^T (D^T)^+ Z(C^T)(q - Dv) + v(k), \quad (24)$$

$$k = \overline{(0, k_S - 1)}, \quad \forall v \in R^{k_S m \times 1},$$

де для вектора Dv справедливе представлення

$$Dv = \begin{pmatrix} D_v(1) \\ \dots \\ D_v(S) \end{pmatrix} \in R^{S \times 1},$$

$$D_v(i) = Q_{k_i}^T \sum_{l=0}^{k_S-1} W(k_i, l) v(l), \quad i = \overline{1, S}. \quad (25)$$

Наведені вище формули (17), (18) розв'язків поставленої задачі (1) - (2) для випадку, коли ранг матриці $C = \in R^{S \times n}$ дорівнює n , визначають єдиний вектор початкових умов $x(0)$, а тому виконуються необхідні і достатні умови єдиності розв'язку системи (9) [1, 2]:

$$\det(CC^T) > 0. \quad (26)$$

В цьому випадку псевдообернена до матриці $C \in R^{S \times n}$ матриця $C^+ \in R^{n \times S}$ співпадає з матрицею C^{-1} , а другий доданок в формулі (17) відсутній.

Література.

1. Кудін Г.І, Оптимізація структур для лінійних систем керування. І. //Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки. - 2004. - Вип. № 2. - с. 279-283.
2. Бублик С.Б., Кудін Г.І, Керування лінійними дискретними системами з крайовими умовами при фазових обмеженнях //Вісник Київського університету. Серія фізико-математичні науки. - 2005. - Вип. № 3. - с. 200-207.
3. Кириченко Н.Ф., Лепеха Н.П. Применение псевдообратных и проекционных матриц к исследованию задач управления, наблюдения и идентификации //Кибернетика и системный анализ. 2002. - №4. - с. 107 - 124.

Надійшла до редколегії 20.03.2006

УДК 519.21

Ольга В.Лукович

Про ергодичний розподіл пуасонівського процесу на відрізку

Розглядається узагальнений процес Пуасона на відрізку з відбиваючими екранами на кінцях відрізка. Доведена теорема існування ергодичного розподілу.

Ключові слова: узагальнений процес Пуасона, ергодичний розподіл

Olga V.Lukovych

On ergodic distribution of a poisson process on the interval

The paper deals with a compound Poisson process on the interval with reflection on its ends. The theorem on existence of the ergodic distribution is proved.

Key Words: compound Poisson process, ergodic distribution

E-mail: lukovych@unicyb.kiev.ua

Розглянемо узагальнений однорідний процес Пуасона $\xi(t)$, $t \geq 0$, $\xi(0) = 0$ зі зсувом. Характеристична функція приростів такого процесу може бути подана у вигляді

$$M e^{s(\xi(t) - \xi(0))} = e^{tk(s)}, \quad \operatorname{Re} s = 0,$$

де $k(s) = as + \lambda \int_{-\infty}^{+\infty} (e^{sx} - 1) dF(x)$.

В цьому зображенні $\lambda > 0$ є інтенсивністю стрибків процесу $\xi(t)$, $F(x)$ є функцією розподілу величини стрибка, а коефіцієнт a є параметром зсуву і на протязі цієї статті постійно вважається додатнім.

Нехай $T > 0$ буде деяке фіксоване число і $\xi(0) = u \in [0; T]$. Процес Пуасона з відбиттям на рівні T задається таким співвідношенням

$$\xi^+(t) = u + \xi(t) - \max\{0, \inf_{0 \leq u \leq t} (u + \xi(u) - T)\}. \quad (1)$$

Означений таким чином процес буде строго марківським. Процес $\xi^+(t)$ у випадку відсутності додатних стрибків вивчався в [1]. У випадку присутності і додатних стрибків процес з (1) розглядався в [2], де при деяких обмеженнях на розподіл додатних стрибків було досліджено розподіл функціоналів пов'язаних з першим досягненням нульового рівня.

Нехай $\tau_1^* = \inf\{t: \xi^+(t) \leq 0\}$ – момент першого досягнення від'ємної півосі процесом $\xi^+(t)$. Задамо процес $\xi^*(t)$ наступним чином:

$$\xi^*(t) = \begin{cases} \xi^+(t), & t < \tau_1 \\ \xi^+(t) - \xi^+(\tau_1), & t \geq \tau_1 \end{cases} \quad (2)$$

Означимо $\tau_2^* = \inf\{t > \tau_1 : \xi^*(t) \leq 0\}$. До моменту τ_2^* процес $\xi^*(t)$ розвивається згідно з (2), а після цього моменту він визначається за допомогою приростів процесу $\xi^+(t)$, так як і в (2), тобто

$$\xi^*(t) = \begin{cases} \xi^*(t) & t < \tau_i^* \\ \xi^+(t) - \xi^+(\tau_i^*) & t \geq \tau_i^* \end{cases} \quad (3)$$

де $\tau_i^* = \inf\{t > \tau_{i-1}^* : \xi^*(t) \leq 0\}$, $i = 3, 4, \dots$

Розглянемо, що відбувається від того моменту, коли процес $\xi^*(t)$ попадає на рівень T . Внаслідок строгої марківості достатньо розглянути один з таких моментів. Отже нехай η буде першим моментом, коли процес $\xi^*(t)$ приймає значення T і $\alpha = F(0)$. Кількість стрибків вгору процесу $\xi(t)$ має геометричний розподіл з параметром $1-\alpha$, а оскільки проміжки між стрибками не залежать від величини стрибків і мають показниковий розподіл з параметром λ то, якщо ми позначимо через ζ час, який процес $\xi^*(t)$ провів на рівні T починаючи від моменту η і до першого стрибка вниз, то

$$G(t) = P(\zeta < t) = \alpha \sum_{n=1}^{\infty} (1-\alpha)^{n-1} G_n(t) \quad (4)$$

де $G_n(t)$ – розподіл Ерланга з параметрами n, λ .

А якщо через θ позначимо величину першого стрибка вниз, то випадкові величини ζ, θ є незалежними і

$$P(\theta < x) = \frac{\alpha - F(-x)}{\alpha} \quad (5)$$

Розглянемо питання про існування ергодичного розподілу для процесу $\xi^*(t)$. На перший погляд існування такого розподілу є очевидним адже процес $\xi^*(t)$ приймає значення з скінченного відрізка $[0; T]$ і тому існування $\lim_{t \rightarrow \infty} P(\xi^*(t) \leq z / \xi^*(0) = x)$ видається цілком природнім. Але нам невідоме строге математичне обґрунтування цього факту.

Неважко зрозуміти, що послідовність $\tau_1^*, \tau_2^*, \dots$ утворює процес відновлення з затримкою. При цьому випадкові величини $\tau_i^* - \tau_{i-1}^*$, $i \geq 2$ є незалежними і однаково розподілені, а величина τ_1^* теж незалежна від них, але може мати інший розподіл.

Позначимо $B(u) = P(\tau_i^* - \tau_{i-1}^* < u)$, $i \geq 2$ тоді, очевидно, що для $0 < x < T$ маємо

$$P\left(\xi^*(t) \leq z / \xi^*(0) = x\right) = P\left(\tau_1^* > t, \xi^*(t) \leq z / \xi^*(0) = x\right) + \int_0^t P\left(\tau_1^* \in dv / \xi^*(0) = x\right) \cdot \int_0^{t-v} P\left(\xi^+(t-v-u) \leq z, \inf_{t-v-u \leq s \leq t} \xi^+(s) > 0 / \xi^+(0) = 0\right) d\Phi(u), \quad (5)$$

де $\Phi(u)$ – функція відновлення породжена розподілом $B(u)$. Якщо $m = M(\tau_i^* - \tau_{i-1}^*) < \infty$, то з (5) та вузлової теореми відновлення маємо

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P\left(\xi^*(t) < z / \xi^*(0) = x\right) = \frac{1}{m} \int_0^{\infty} P\left(\xi^*(t) < z, \inf_{0 \leq s \leq t} \xi^*(s) > 0 / \xi^*(0) = 0\right) dt \equiv \Phi(z). \quad (6)$$

Якщо довести, що $m < \infty$, то формула (6) дає вигляд ергодичного розподілу, оскільки тоді інтеграл в (6) теж буде скінчений.

$$\int_0^{\infty} P\left(\xi^+(t) < z, \inf_{0 \leq s \leq t} \xi^+(s) > 0 \mid \xi^+(0) = 0\right) dt = \int_0^{\infty} P\left(\xi^+(t) < z, \tau_1^+ > t \mid \xi^+(0) = 0\right) dt \leq \\ \leq \int_0^{\infty} P\left(\tau_1^+ > t \mid \xi^+(0) = 0\right) dt = m < \infty,$$

оскільки при умові $\xi^+(0)=0$, випадкові величини τ_1^+ , $\tau_i^+ - \tau_{i-1}^+$, $i \geq 2$, мають такі самі розподіли.

Лема. $m = M(\tau_i^+ - \tau_{i-1}^+) < \infty$ (7)

Доведення. Нерівність (7) виглядає правдоподібною з огляду на той факт, що інтервали між стрибками вихідного процесу $\xi(t)$ мають скінченне математичне сподівання, а присутність відбиваючої границі на рівні T виключає можливість того, що $\xi^+(t) \rightarrow \infty$, $t \rightarrow \infty$ з додатною ймовірністю. Але оскільки в літературі ми не знайшли строгого обґрунтування факту (7), то подамо відповідне доведення.

Процес $\xi(t)$ можемо подати в такому вигляді

$$\xi(t) = \xi(0) + at + \sum_{i=1}^{N(t)} \xi_i, \quad (8)$$

де $N(t)$ є пуассонівським процесом з параметром λ , а ξ_i - послідовність незалежних однаково розподілених величин, незалежних від $N(t)$ і таких що $P(\xi_i < x) = F(x)$. Поряд (8) розглянемо наступний процес

$$\bar{\xi}(t) = \xi(0) + at + \sum_{i=1}^{N(t)} \bar{\xi}_i,$$

де $\bar{\xi}_i = \begin{cases} \xi_i, & \text{якщо } \xi_i \leq 0; \\ T, & \text{якщо } \xi_i > 0. \end{cases}$

Неважко зрозуміти що розподіл випадкової величини $\bar{\xi}_i$ є наступним

$$\bar{F}(x) = P(\bar{\xi}_i < x) = \begin{cases} F(x), & x \leq 0; \\ \alpha, & 0 < x \leq T; \\ 1, & x > T. \end{cases} \quad (9)$$

Позначимо через $\bar{\xi}^+(t)$ процес, який отримується з $\bar{\xi}_i$, відбиттям останнього на рівні T (визначається формулою (1) з заміною $\xi(t)$ на $\bar{\xi}(t)$).

Нехай τ_x^+ та $\bar{\tau}_x^+$ моменти першого досягнення від'ємної півосі процесами $\xi^+(t)$ та $\bar{\xi}^+(t)$ відповідно. Легко помітити, що кожен додатний стрибок процесу $\bar{\xi}^+(t)$ на відрізку $[0; \bar{\tau}_x^+)$ веде до того, що він попадає на рівень T , а тому траєкторії процесу $\xi^+(t)$ будуть лежати не вище траєкторій процесу $\bar{\xi}^+(t)$ (звичайно при умові, що ці процеси стартують з того самого пункту). Тому наступна нерівність є очевидною

$$\tau_x^+ \leq \bar{\tau}_x^+. \quad (10)$$

Знайдемо тепер формулу для $M\bar{\tau}_x^+$.

$$c = \frac{sR_{s+1-\alpha}(T)}{R'_{s+1-\alpha}(T) \left(\lambda(1-\alpha) \int_0^T R_{s+1-\alpha}(y) dy - 1 \right) - R^2_{s+1-\alpha}(T) \lambda(1-\alpha)} \quad (16)$$

Зауважимо, що $M\bar{\tau}_0^{-T} = -\lim_{s \rightarrow \infty} \frac{\varphi_T(s, 0)}{s}$, а тому поклавши в (12) $x = 0$ та

враховуючи формулу (16), а також той факт, що $R_{s+1-\alpha}(+0) = \frac{1}{a}$ (це легко випливає з (13) та тауберової теореми) маємо

$$M\bar{\tau}_0^{-T} = \frac{R_{1-\alpha}(T)a^{-1}}{R'_{1-\alpha}(T) \left(1 - \lambda(1-\alpha) \int_0^T R_{1-\alpha}(y) dy \right) + \lambda(1-\alpha)R^2_{1-\alpha}(T)} \quad (17)$$

Нам залишилось показати, що знаменник в (17) завжди відмінний від нуля. Введемо позначення

$$\phi_s(x) = R'_{s+1-\alpha}(x) \left(1 - \lambda(1-\alpha) \int_0^x R_{1-\alpha}(y) dy \right) + \lambda(1-\alpha)R^2_{s+1-\alpha}(x), \quad s > 0.$$

Як легко зауважити, функція $\phi_s(x)$ є неперервною по s і тому якби для деякого $z_0 > 0$ ми мали $\phi_0(z_0) < 0$, то можна було б вказати $s_0 > 0$ таке, що $\phi_{s_0}(z_0) < 0$. Але тоді з (16) мали б

$$0 > Me^{-s_0 \tau_0} - 1 = \frac{-s_0 R_{s_0+1-\alpha}(z_0)a^{-1}}{\phi_{s_0}(T_0)} > 0$$

і прийшли до протиріччя.

Покажемо тепер, що якщо $\phi_0(x_0) > 0$, то $\phi_0(x) > 0$ для всіх $0 \leq x \leq x_0$. Нехай $x \in [0, x_0]$ є фіксованим. Позначимо $\tau(x) = \inf\{t: \xi(t) \geq x\}$. Тоді, згідно результатів [3], ймовірність $P(\bar{\xi}(\tau(x)) = x \mid \bar{\xi}(0) = 0) \equiv p > 0$. Тому, використовуючи марківську властивість процесу $\xi(t)$ в момент $\tau(x)$ можемо записати

$$M\bar{\tau}_0^{x_0} \geq p \cdot M\bar{\tau}_0^{x_0-x} \quad (18)$$

Оскільки, згідно з (17)

$$M\bar{\tau}_0^{x_0} = \frac{R_{1-\alpha}(x_0)a^{-1}}{\phi_0(x_0)} < \infty, \quad (19)$$

то з (18) маємо, що $M\bar{\tau}_0^{x_0-x} < \infty$ і записавши тепер (17) з $x_0 - x$ замість T дістанемо $\phi_0(x_0 - x) < \infty$ для $0 \leq x_0 \leq x$.

Нехай $b = \inf\{x > 0 : \phi_0(x) = 0\}$. Згідно з тільки що доведеним маємо

$$\phi_0(x) > 0, \quad 0 \leq x < b. \quad (20)$$

Оскільки функція $\phi_0(x)$ є неперервна по x , то $\phi_0(b) = 0$, а отже згідно (19)

$$M\bar{\tau}_0^b = \infty \quad (21)$$

але згідно (20) (і знову таки (19))

$$M\bar{\tau}_0^{b-\varepsilon} < \infty \quad (22)$$

для кожного $\varepsilon > 0$.

Поряд з $\xi^*(t)$, побудуємо процес $\bar{\xi}^*(t)$ з обривом в момент ζ наступним чином. Нехай $\bar{\xi}^*(0) = \varepsilon \in (0, b)$ деяке додатне число і

$$\theta_\varepsilon(1) = \inf \left\{ t > 0 : \bar{\xi}^*(t) \leq \varepsilon \mid \bar{\xi}^*(0) = \varepsilon \right\}$$

Тоді $\bar{\xi}^*(t) = \xi^*(t)$, $0 \leq t < \theta_\varepsilon(1)$. В момент $\theta_\varepsilon(1)$ процес $\bar{\xi}^*(t)$ обривається, тобто $\zeta = \theta_\varepsilon(1)$, якщо $\bar{\xi}^*(\theta_\varepsilon(1)) = 0$. Якщо ж $0 < \bar{\xi}^*(\theta_\varepsilon(1)) \leq \varepsilon$, то і момент $\theta_\varepsilon(1)$ є моментом регенерації процесу $\bar{\xi}^*(t)$, тобто еволюція процесу $\bar{\xi}^*(t)$ після $\theta_\varepsilon(1)$ є ймовірнісною копією еволюції після моменту $t = 0$.

Якщо тепер позначити через $\theta_\varepsilon(i)$, $i = 1, 2, \dots$ послідовні моменти, коли процес $\bar{\xi}^*(t)$ був рівний ε , то, ζ співпадає з одним з $\theta_\varepsilon(i)$ (або $\zeta = \infty$). Випадкові величини $\theta_\varepsilon(1)$, $\theta_\varepsilon(i) - \theta_\varepsilon(i-1)$, $i = 2, 3, \dots, n$ однаково розподілені при умові, що $\zeta > \theta_\varepsilon(n)$ і згідно (22)

$$M\theta_\varepsilon(1) = M\bar{\tau}_0^{b-\varepsilon} = M < \infty \quad (23)$$

З нашої конструкції процесу $\bar{\xi}^*(t)$ виникає наступна нерівність

$$M\bar{\tau}_0^b \leq M \left(\zeta \mid \bar{\xi}^*(0) = \varepsilon \right) \quad (24)$$

Виберемо $\varepsilon \in (0, b)$ таким чином, щоб виконувалося співвідношення $P(0 < \bar{\xi}^*(\theta_\varepsilon) \leq \varepsilon) = p \in (0, 1)$.

Якщо $\nu = \inf\{n : \theta_\varepsilon(n) = \zeta\}$, то $P(\nu = k) = p^{k-1}(1-p)$ $k \geq 1$ і

$$\zeta = \sum_{i=1}^{\nu} (\theta_\varepsilon^r(i) - \theta_\varepsilon^r(i-1)) \quad \theta_\varepsilon^r(0) \equiv 0, \text{ а отже з (23), (24) дістанемо}$$

$$M\bar{\tau}_0^b \leq M \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^n (\theta_\varepsilon(i) - \theta_\varepsilon(i-1)) p^{n-1} (1-p) \leq M \sum_{n=1}^{\infty} n p^{n-1} (1-p) < \infty$$

що суперечить (21). Отже, $b = \infty$ і потрібний нам факт доведено. Так як $\phi_0(x) > 0$ для всіх $x < \infty$ і з (10), (17) отримуємо $m = M\bar{\tau}_0^r < \infty$.

Література

1. Корольок В.С. Граничные задачи для сложных пуассоновских процессов.- Киев: Наукова Думка, 1975.
2. Братійчук М.С. Лукович О.В. Задача про розорення для узагальненого процесу Пуасона з відбиттям// УМЖ- 2005- 11
3. Millar, P.W. Exit properties of stochastic process with stationary independent increments// Transection of the American Mathematical Society- 1973-v. 178- p.459- 479.

УДК 519.7

Наталія В. Майко¹
В'ячеслав Л. Рябічев²,

Nataliya V. Maiko¹
Vyacheslav L. Ryabichev²,

**Реалізація паралельного методу
довільного порядку точності для
еволюційного рівняння зі змін-
ним оператором**

**Numerical analysis of a parallel
high-accuracy method for a first-
order evolution equation with a
time-dependent operator**

*Досліджено застосування методу
апроксимації еволюційного оператора
при наближеному розв'язуванні почат-
ково-крайової задачі для параболічного
рівняння.*

*The application of the method of the
evolution operator approximation for ap-
proaching the exact solution of the Cauchy
problem for an abstract parabolic equation
is investigated.*

*Ключові слова: абстрактна задача
Коші, необмежений операторний коефі-
цієнт, еволюційний оператор, апрокси-
мація точного розв'язку, сильна стій-
кість.*

*Key words: the abstract Cauchy
problem, an unbounded operator coeffi-
cient, the evolution operator, an approxi-
mate solution, strong stability.*

¹ E-mail: maiko@univ.kiev.ua

² E-mail: ryabichev@univ.kiev.ua

1. Вступ

Розглянемо в гільбертовім просторі H задачу Коші для операторно-диференціального рівняння першого порядку:

$$u'(t) + A(t)u(t) = f(t), \quad t > 0, \quad (1)$$

$$u(0) = u_0, \quad (2)$$

де $t \mapsto f(t)$ і $t \mapsto u(t)$ — відповідно задана і шукана функції зі значеннями в H , $A(t)$ при кожному t — діючий в H самоспряжений додатно визначений необмежений замкнутий оператор, який має щільну в H область визначення $D(A(t))$, не залежну від t .

Апроксимації абстрактної задачі Коші (1)–(2) присвячена немала кількість праць (див., наприклад, [1, 2]). Проте в більшості запропонованих підходів використані добре відомі різницеві схеми (методи Рунге–Кутти і т. п.), які узагальнені на абстрактний випадок. Тож актуальним є розроблений в [3] новий метод наближення розв'язку через апроксимацію еволюційного оператора, перевагами якого є довільний порядок точності та можливість розпаралелювання обчислень.

Метою нашої роботи є реалізація побудованого в [3] алгоритму та проведення числових розрахунків.

2. Наближений метод розв'язування задачі Коші для абстрактного параболічного рівняння [3]

2.1. Апроксимація розв'язку через апроксимацію еволюційного оператора. Увівши на $[0, T]$ сітку $\bar{\omega} = \{0 = t_0 < t_1 < \dots < t_M = T\}$ і поклавши

$$A_k = A(t_{k-1}), \quad t \in [t_{k-1}, t_k], \quad k = \overline{1, M}, \quad \tau = \max_{1 \leq k \leq M} \tau_k, \quad \tau_k = t_k - t_{k-1},$$

за наближення еволюційного оператора $U(t, s)$ задачі (1)–(2) візьмемо оператор

$$U_k^m(t, s) = \sum_{j=0}^m U_k^{(j)}(t, s), \quad t_{k-1} \leq s \leq t \leq t_k, \quad k = \overline{1, M}, \quad (3)$$

$$\text{де } U_k^{(j+1)}(t, s) = \int_s^t e^{-(t-\xi)A_k} (A_k - A(\xi)) U_k^{(j)}(t, \xi) d\xi, \quad j = \overline{0, m-1}, \quad (4)$$

$$U_k^{(0)}(t, s) = e^{-(t-s)A_k}. \quad (5)$$

Тоді для наближення точного розв'язку на $[t_{k-1}, t_k]$ дістанемо

$$u_k^m(t) = U_k^m(t, t_{k-1}) u_{k-1}^m(t_{k-1}) + \int_{t_{k-1}}^t U_k^m(t, s) f(s) ds,$$

а звідси — рекурентне співвідношення відносно невідомих $u_k^m(t_k)$:

$$U_k^m(t_k, t_{k-1}) u_{k-1}^m(t_{k-1}) + \int_{t_{k-1}}^{t_k} U_k^m(t_k, s) f(s) ds = u_k^m(t_k), \quad k = \overline{1, M}, \quad (6)$$

$$u_0^m(t_0) \equiv u_0^m(0) = u_0. \quad (7)$$

2.2. Аналіз похибки методу. Позначимо $z_k^m(t) = u(t) - u_k^m(t)$ похибку методу (6)–(7) на проміжку $[t_{k-1}, t_k]$.

Доведено таке твердження [3].

Теорема 1. Нехай $A(t)$ — діючий в H самоспряжений додатно визначений оператор зі щільною в H областю визначення $D(A(t))$, не залежною від t . Якщо виконано умову

$$\| [A(t) - A(s)] A^{-1}(t) \| \leq L_1 |t - s| \quad (t, s \in [0, T]), \quad (8)$$

то для похибки методу (6)–(7) справджується оцінка

$$\begin{aligned} & (A_k z_k^m(t_k), z_k^m(t_k)) + (1 - 2L_1^2 \tau^2) \int_{t_{k-1}}^{t_k} \|A_k z_k^m(s)\|^2 ds \leq \\ & \leq 2(L_1 \tau)^{2(m+1)} e^{c\nu t_{k-1}} \sum_{p=0}^{k-1} \left(\int_{t_{k-p-1}}^{t_{k-p}} \|f(s)\|^2 ds + 2(A_{k-p} u(t_{k-p-1}), u(t_{k-p-1})) \right) = \\ & = 2(L_1 \tau)^{2(m+1)} e^{c\nu t_{k-1}} \left(\int_0^{t_k} \|f(s)\|^2 ds + 2 \sum_{p=0}^{k-1} (A_{k-p} u(t_{k-p-1}), u(t_{k-p-1})) \right), \end{aligned} \quad (9)$$

де $\tau / \min_{1 \leq k \leq M} \tau_k \leq \nu$, а стала $c > 0$ не залежить від τ .

2.3. Стійкість. При дослідженні початково-крайових задач для нестационарних рівнянь математичної фізики важливим є питання про стійкість розв'язків при збуренні початкових даних, правої частини та операторних коефіцієнтів (сильна стійкість). Розглянемо дві задачі Коші:

$$u'(t) + A(t)u(t) = f(t), \quad t \in]0, T],$$

$$u(0) = u_0,$$

$$v'(t) + B(t)v(t) = g(t), \quad t \in]0, T],$$

$$v(0) = v_0.$$

Достатні умови сильної стійкості розв'язків цих задач одержано в [3], де, на відміну від результатів [4] про сильну стійкість операторно-різницевої схем, не вимагається, щоб вихідний і збурений оператори комутували.

Різниця $z(t) = u(t) - v(t)$, очевидно, є розв'язком задачі

$$\frac{dz(t)}{dt} + A(t)z(t) = -[A(t) - B(t)]v(t) + f(t) - g(t), \quad t \in]0, T],$$

$$z(0) = u_0 - v_0.$$

Теорема 2. Якщо діючі в гільбертовім просторі H самоспряжений додатно визначений оператор $C = C^* \geq c_0 I$, $c_0 > 0$, та замкнуті оператори $A(t)$ і $B(t)$ мають щільну в H спільну область визначення $D(C) = D(A(t)) = D(B(t))$ і задовольняють умови

$$\| [A(t) - B(t)]C^{-1} \| \leq \gamma \quad (t \in [0, T]), \quad (10)$$

$$(A(t)y, Cy) \geq c_0 \|Cy\|^2, \quad (B(t)y, Cy) \geq c_0 \|Cy\|^2 \quad (11)$$

$$(t \in [0, T], y \in D(A(t)) = D(B(t))),$$

то задача Коші (1)-(2) є сильно стійкою і для неї справджується оцінка

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} (Cz(t), z(t)) + (c_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int_0^t \|Cz(s)\|^2 ds \leq \\ & \leq \max_{0 \leq t \leq T} \| [A(t) - B(t)]C^{-1} \|^2 \cdot \frac{1}{4\varepsilon_1(c_0 - \varepsilon_3)} \left(\frac{1}{4\varepsilon_3} \int_0^t \|g(s)\|^2 ds + \frac{1}{2} (Cv_0, v_0) \right) + \\ & + \frac{1}{4\varepsilon_2} \int_0^t \|f(s) - g(s)\|^2 ds + \frac{1}{2} (C(u_0 - v_0), u_0 - v_0), \end{aligned} \quad (12)$$

де $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ — довільні додатні сталі такі, що $c_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2 > 0$ і $c_0 - \varepsilon_3 > 0$.

3. Реалізація методу

Нехай функція $t \mapsto q(t)$, $q(t) \geq q_0 > 0$, задовольняє на $[0, T]$ умову Гельдера з показником $\alpha \in]0, 1]$. Розглянемо початково-крайову задачу

$$\frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + \frac{\partial^4 u}{\partial t^4}(x, t) - 2q(t) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(x, t) + q^2(t)u(x, t) = f(x, t), \quad 0 \leq x \leq 1, \quad 0 < t \leq T, \quad (13)$$

$$u(0,t) = u(1,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(0,t) = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}(1,t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (14)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1. \quad (15)$$

При $T = 1$, $q(t) = 1 + t$, $f(x,t) = \sin \pi x \cdot [1 + t(\pi^2 + 1 + t)^2]$, $u_0(x) = 0$ функція $u(x,t) = \sin \pi x \cdot t$, очевидно, задовольняє рівняння (13), крайові умови (14) і початкову умову (15).

Розглянемо діючий в $H = L_2(0,1)$ оператор $A(t) = \left[-\frac{d^2}{dx^2} + q(t)I \right]^2$ (I — тотожний оператор) зі щільною в H і не залежною від t областю визначення

$$D(A(t)) = \{u \in W_2^4(0,1) : u(0) = u''(0) = u(1) = u''(1) = 0\}.$$

Тоді задача (13)–(15) переходить в абстрактну задачу Коші

$$u'(t) + A(t)u(t) = f(t), \quad 0 < t \leq 1, \quad (16)$$

$$u(0) = 0, \quad (17)$$

для числового розв'язування якої скористаємося методом (6)–(7) і результатами п. 2.3. Очевидно,

$$A(t) = B_{0,k} + B_{1,k}(t - t_{k-1}) + B_{2,k}(t - t_{k-1})^2, \quad t \in [t_{k-1}, t_k], \quad (18)$$

$$\text{де } B_{0,k} = \frac{d^4}{dx^4} - 2(1 + t_{k-1})\frac{d^2}{dx^2} + (1 + t_{k-1})^2 I, \quad D(B_{0,k}) = D(A(t)),$$

$$B_{1,k} = -2\frac{d^2}{dx^2} + 2(1 + t_{k-1})I, \quad D(B_{1,k}) = \{u \in W_2^1(0,1) : u(0) = u(1) = 0\}, \quad B_{2,k} = I;$$

$$f(t) = f_{0,k} + f_{1,k}(t - t_{k-1}) + f_{2,k}(t - t_{k-1})^2 + f_{3,k}(t - t_{k-1})^3, \quad t \in [t_{k-1}, t_k], \quad (19)$$

$$\text{де } f_{j,k} = \sin \pi x \cdot a_{j,k}, \quad j = 0, 1, 2, 3;$$

$$a_{0,k} = 1 + t_{k-1}(\pi^2 + 1 + t_{k-1})^2, \quad a_{1,k} = (\pi^2 + 1 + t_{k-1})^2 + 2t_{k-1}(\pi^2 + 1 + t_{k-1}),$$

$$a_{2,k} = 2(\pi^2 + 1 + t_{k-1}) + t_{k-1}, \quad a_{3,k} = 1.$$

Зважаючи на розклади (18) і (19), за наближення $B(t)$ і $g(t)$ оператора і правої частини рівняння (16) на $[t_{k-1}, t_k]$ візьмемо відповідно оператор $B_{0,k}$ і вектор $f_{0,k}$. Тоді задача Коші

$$v'(t) + B(t)v(t) = g(t), \quad 0 < t \leq 1, \quad (20)$$

$$v(0) = 0, \quad (21)$$

апроксимує задачу (16)–(17). Поклавши

$$C = -\frac{d^2}{dx^2}, \quad D(C) = \{u \in W_2^1(0,1) : u(0) = u(1) = 1\} \quad (c_0 = 2),$$

перевіримо виконання умов теореми 2. Очевидно,

$$C^{-1}w = \int_0^1 G(x, \xi)w(\xi)d\xi, \quad \text{де } G(s, \xi) = \begin{cases} x(1 - \xi) & \text{при } x \leq \xi, \\ \xi(1 - x) & \text{при } \xi \leq x. \end{cases}$$

а значить, для кожного $t \in [t_{k-1}, t_k]$

$$\begin{aligned} (A(t) - B(t))C^{-1}w &= (A(t) - B_{0,k})C^{-1}w = (B_{1,k}(t - t_{k-1}) + B_{2,k}(t - t_{k-1})^2)C^{-1}w = (t - t_{k-1}) \times \\ &\times \left(-2 \frac{d^2}{dx^2} \int_0^1 G(x, \xi) w(\xi) d\xi + 2(1 + t_{k-1}) \int_0^1 G(x, \xi) w(\xi) d\xi \right) + (t - t_{k-1}) \int_0^1 G(x, \xi) w(\xi) d\xi = \\ &= (t - t_{k-1}) \left(2w(x) + 2(1 + t_{k-1}) \int_0^1 G(x, \xi) w(\xi) d\xi \right) + (t - t_{k-1})^2 \int_0^1 G(x, \xi) w(\xi) d\xi. \end{aligned}$$

Звідси на підставі нерівності $\|C^{-1}w\|_{L_2(0,1)} \leq \frac{1}{\sqrt{90}} \|w\|_{L_2(0,1)}$ випливає оцінка

$$\|(A(t) - B_{0,k})C^{-1}w\|_{L_2(0,1)} \leq \|w\|_{L_2(0,1)} \left(2 + \frac{2(1+T)}{\sqrt{90}} + \frac{\tau_k}{\sqrt{90}} \right) \tau_k, \quad t \in [t_{k-1}, t_k], \quad (22)$$

а отже, й оцінка (10) при $\gamma = \left(2 + \frac{2+3T}{\sqrt{90}} \right) T$. Крім того,

$$\begin{aligned} (A(t)y, Cy) &= - \int_0^1 (y^{(IV)}(x) - 2(1+t)y''(x) + (1+t)^2 y(x)) y''(x) dx \geq \int_0^1 (y'''(x))^2 dx + \\ &+ 2(1+t) \int_0^1 (y''(x))^2 dx + (1+t)^2 \int_0^1 (y'(x))^2 dx \geq 2 \int_0^1 (y''(x))^2 dx = 2 \|Cy\|_{L_2(0,1)}^2, \quad t \in [0, T]. \end{aligned}$$

Аналогічно при $t \in [t_{k-1}, t_k]$ дістаємо

$$\begin{aligned} (B(t)y, Cy) &= (B_{0,k}y, Cy) = \\ &= - \int_0^1 (y^{(IV)}(x) - 2(1+t_{k-1})y''(x) + (1+t_{k-1})^2 y(x)) y''(x) dx \geq 2 \|Cy\|_{L_2(0,1)}^2, \end{aligned}$$

а відтак і при $t \in [0, T]$ маємо $(B(t)y, Cy) \geq 2 \|Cy\|_{L_2(0,1)}^2$.

Таким чином, оператори $A(t)$, $B(t)$ і C задовольняють вимоги (10), (11), а нерівність (12) з урахуванням оцінки (22) набуває вигляду

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2} \|z'_x(\cdot, t)\|_{L_2(0,1)}^2 + (c_0 - \varepsilon_1 - \varepsilon_2) \int_0^t \|z''_{xx}(\cdot, t)\|_{L_2(0,1)}^2 dt \leq \\ &\leq \left(2 + \frac{2+3T}{\sqrt{90}} \right)^2 \tau^2 \frac{1}{4\varepsilon_1(c_0 - \varepsilon_3)} \frac{1}{4\varepsilon_3} \int_0^t \|g(s)\|_{L_2(0,1)}^2 ds + \frac{1}{4\varepsilon_2} \int_0^t \|f(s) - g(s)\|_{L_2(0,1)}^2 ds, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{де } \int_0^t \|g(s)\|_{L_2(0,1)}^2 ds &\leq \int_0^t \|g(t)\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \sum_{k=1}^M \int_{t_{k-1}}^{t_k} \|g(t)\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \sum_{k=1}^M \int_{t_{k-1}}^{t_k} \|f_{0,k}\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \\ &= \sum_{k=1}^M \frac{1}{2} a_{0,k}^2 \tau_k \leq \frac{T(1+T(\pi^2+1+T)^2)}{2}, \quad t \in [0, T]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int_0^t \|f(s) - g(s)\|_{L_2(0,1)}^2 ds &\leq \int_0^t \|f(t) - g(t)\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \sum_{k=1}^M \int_{t_{k-1}}^{t_k} \|f(t) - g(t)\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \\ &= \sum_{k=1}^M \int_{t_{k-1}}^{t_k} \|f(t) - f_{0,k}\|_{L_2(0,1)}^2 dt = \sum_{k=1}^M \int_{t_{k-1}}^{t_k} \frac{1}{2} (a_{1,k}(t - t_{k-1}) + a_{2,k}(t - t_{k-1})^2 + a_{3,k}(t - t_{k-1})^3)^2 dt \leq \\ &\leq c\tau^2, \quad t \in [0, T] \quad (c \text{ — деяка додатна стала}), \end{aligned}$$

і, отже, для числового розв'язування збуреної задачі Копі (20)–(21) у співвідношеннях (6)–(7) можна взяти $m = 1$:

$$v_k^1(t_k) = e^{-\tau_k B_{0,k}} v_{k-1}^1(t_{k-1}) + \left[B_{0,k}^{-1} - B_{0,k}^{-1} e^{-\tau_k B_{0,k}} \right] f_{0,k}, \quad k = \overline{1, M}, \quad v_0^1(0) = 0. \quad (23)$$

Згідно з методом перетворення Келі [5], при будь-якому $x_0 \in D(B_{0,k}^\sigma)$, $\sigma > 1$, для $x = e^{-\tau_k B_{0,k}} x_0$ правильне зображення

$$x = e^{-\tau_k} \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p L_p^{(0)}(2\gamma\tau_k)(y_{\gamma,p} + y_{\gamma,p+1}), \quad (24)$$

де γ — довільна додатна стала, $L_p^{(0)}(t)$ — поліноми Лагерра, а елементи $y_{\gamma,p}$, $p = 0, 1, \dots$, є розв'язками рекурентної послідовності "еліптичних" задач

$$(\gamma I + B_{0,k}) y_{\gamma,p+1} = (\gamma I - B_{0,k}) y_{\gamma,p}, \quad p = 0, 1, \dots, \quad y_{\gamma,0} = x_0.$$

M	$\varepsilon_M = \ u(1) - v_M^1(1)\ _{L_2(0,1)}$	$\delta = \log_2(\varepsilon_M / \varepsilon_{2M})$
2	0.2480509407914848	0.8394
4	0.1386336521919185	0.9796
8	0.0703037883547132	1.0124
16	0.0348505124666610	1.0493
32	0.0168397906225848	1.1018
64	0.0078464856794619	1.1642
128	0.0035011964232520	1.1792
256	0.0015461300179676	1.0963
512	0.0007231275747906	1.0339
1024	0.0003531723269025	

Наближаючи x відрізком ряду (24)

$$x^N = e^{-\tau_k} \sum_{p=0}^N (-1)^p L_p^{(0)}(2\gamma\tau_k)(y_{\gamma,p} + y_{\gamma,p+1}) \quad (25)$$

при $\gamma = 1$, беручи до уваги $\sigma = 1$ та зважаючи на оцінку [5]

$$\|x^N - x\| \leq cN^{-\sigma} \|A^\sigma x_0\|,$$

де c — не залежна від N і x_0 стала, покладаємо $N = M$. Тоді рівності (23) з урахуванням (25) набувають вигляду

$$v_k^1(t_k) = e^{-\tau_k} \sum_{p=0}^M (-1)^p L_p^{(0)}(2\tau_k)(y_{\tau,p} + y_{\tau,p+1}) + B_{0,k}^{-1} f_{0,k}, \quad k = \overline{1, M}, \quad v_0^1(0) = 0, \quad (26)$$

а елементи $y_{\tau,p}$ задовольняють рекурентні співвідношення

$$(\gamma I + B_{0,k})y_{\tau,p+1} = (\gamma I - B_{0,k})y_{\tau,p}, \quad p = 0, 1, \dots, M, \quad y_{\tau,0} = v_{k-1}^1(t_{k-1}) - B_{0,k}^{-1} f_{0,k}.$$

Дані числових розрахунків, наведені в таблиці, показують, що $\delta \approx m = 1$.

4. Висновки

З урахуванням сильної стійкості задачі Коші побудовано реалізацію методу апроксимації еволюційного оператора за умови кусково-сталих наближень операторного коефіцієнта і правої частини рівняння. Результати числових розрахунків підтверджують правильність апriorних оцінок швидкості збіжності методу.

Література

1. Gonzalez D. C., Palencia C. Stability of time-stepping methods for abstract time-dependent parabolic problems // SIAM Journal on Numerical Analysis. — 1998. — Vol. 5. — No. 3. — P. 973–989.
2. Gonzalez D. C., Palencia C. Stability of Runge–Kutta methods for abstract time-dependent parabolic problems: the Holder case // Mathematics of Computation. — 1999. — Vol. 68. — No. 225. — P. 73–89.
3. Gavriluk I. P., Makarov V. L., Ryabichev V. L. A parallel high-accuracy method for the first-order evolution equation in Hilbert and Banach spaces // Computational Methods in Applied Mathematics. — 2003. — Vol. 3. — № 1. — P. 86–116.
4. Самарский А. А., Вабищевич П. Н., Матус П. П. Разностные схемы с операторными множителями. — Минск, 1998.
5. Gavriluk I. P., Makarov V. L. The Cayley Transform and the Solution of an Initial Value Problem for a First Order Differential Equation with an Unbounded Operator Coefficient in Hilbert Space // Numerical Functional Analysis and Optimization. — 1994. — 15. — 5&6. — P. 583–598.

Надійшла до редакції 29.12.2005

УДК 519.8

Микола М. Маляр¹

Методи групування критеріїв ефективності для задач вибору

Розглядаються підходи поділу множини критеріїв ефективності на підмножини за певними властивостями.

Ключові слова: багатокритеріальність, вибір, критерії ефективності.

Mykola M. Malyar

Grouping of Effectiveness Criteria Methods to Choice Problems

An approaches to effectivity criteria subgrouping methods to choice problems were examined.

Key words: multiple criteria problem, choice, effectivity criteria.

¹ E-mail: cyber@mail.uzhgorod.ua

Вступ. Вибір – це дія на множині альтернатив, у результаті якої початкова множина альтернатив звужується. Вибір є основною задачею прийняття рішень. Різновидність задач вибору пов'язана з тим, що ситуації, в яких виконується вибір, можуть реалізовуватись у якісно різних варіантах. Наприклад, множина альтернатив, з однієї сторони, може бути скінченна, зліченна або континуальна, а з іншої – “закритою” (тобто заданою повністю) або “відкритою” (може поповнюватися у процесі прийняття рішення). Оцінка альтернатив може здійснюватись за одним або декількома критеріями, які у свою чергу, можуть описуватись у кількісній або якісній формах; умови, в яких приймається рішення можуть бути визначеними, імовірнісними, невизначеними; процедури вибору – одноразовими, багаторазовими або з повтореннями; відповідальність за вибір може нести одна людина або колектив і т.д. Як бачимо, задача вибору є складною задачею, тому її описання і розв'язання потребує створення апарату, який би дозволив здійснити формалізацію її складових. Таким апаратом є побудова математичних моделей та їх аналіз.

Постановка задачі. В даній роботі буде розглядатися задача вибору з континуальною множиною альтернатив X , заданою у вигляді обмежень і результат вибору оцінюється декількома критеріями ефективності, які описуються за допомогою лінійних функцій. Тобто задача вибору моделюється за допомогою багатокритеріальної задачі математичного програмування з лінійними цільовими функціями.

Математична модель такої задачі буде виглядати наступним чином: знайти

$$\text{extr}_{x \in X} f_i = \sum_{j=1}^n c_j^i x_j; i = \overline{1, k}, \quad (1)$$

де альтернативи $\bar{x} = (x_1, \dots, x_n) \in n$ -вимірні вектори, k - кількість критеріїв ефективності. Якщо число k є досить великим ($k \geq 10$), то знаходження

212

систем $S(k-l_0)$ мають ненульові розв'язки, то розглядаємо кожну із сукупностей $(k-l_0)$ точок окремо.

Метод «Скалярний добуток». Нехай $\{A_1, A_2, \dots, A_k\}$ – довільна скінченна сукупність точок в n -вимірному евклідовому просторі E_n , які відокремлені деякою гіперплощиною вигляду (2) і координати кожної точки A_i задовольняють нерівність (3).

Розглянемо метод відокремлення точок, який враховує модулі векторів $\vec{r}_i = \overrightarrow{OA_i}$, де O – початок системи координат, $\overrightarrow{OA_i}$ – радіус-вектор точки A_i . Нехай $\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j$ – скалярний добуток векторів $\vec{r}_i$ та $\vec{r}_j$ таких, що кут між ними не більший за $90^\circ (\pi/2)$. Не порушуючи загальності, припустимо, що таких векторів буде k .

Побудуємо матрицю вигляду:

$$\begin{pmatrix} \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_1 & \dots & \dots & \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_k \\ \vec{r}_2 \cdot \vec{r}_1 & \dots & \dots & \vec{r}_2 \cdot \vec{r}_k \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \vec{r}_k \cdot \vec{r}_1 & \dots & \dots & \vec{r}_k \cdot \vec{r}_k \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Оскільки $\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j = |\vec{r}_i| \cdot |\vec{r}_j| \cdot \cos(\angle \vec{r}_i, \vec{r}_j)$, то скалярний добуток буде тим більший, чим модулі більші і кут між цими векторами менший. Припустимо, що $\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_1 \geq \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 \geq \dots \geq \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_k$. Нехай $p_{1j} = \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_j$ і виконуються наступні умови

$$p_{11} = p_{12} = \dots = p_{1j_1} > p_{1j_1+1} = p_{1j_1+2} = \dots = p_{1j_2} > \dots > p_{1j_{s-1}+1} = \dots = p_{1j_s}.$$

Позначивши через φ_{ij} кут між векторами $\vec{r}_i$ та $\vec{r}_j$, знайдемо величину

$$\lambda_1 = \max \left\{ \frac{l_1}{\varphi_{11}}, \frac{l_2}{\varphi_{1j_1+1}}, \dots, \frac{l_s}{\varphi_{1j_{s-1}+1}} \right\}.$$

Елементи кожного рядка матриці (5) можна записати у порядку спадання

$$p_{11} = p_{12} = \dots = p_{1j_1} > p_{1j_1+1} = p_{1j_1+2} = \dots = p_{1j_2} > \dots > p_{1j_{s-1}+1} = \dots = p_{1j_s}.$$

$$\text{Тоді } \lambda_1 = \max \left\{ \frac{l_1'}{\varphi_{11}'}, \frac{l_2'}{\varphi_{1j_1'+1}'}, \dots, \frac{l_s'}{\varphi_{1j_{s-1}'+1}'} \right\}.$$

Позначимо через λ максимальний елемент множини $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k\}$. Знаючи λ , можна відокремити по можливості максимальну кількість векторів серед $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k$, для якої буде враховано як довжини цих векторів, так і їх скупченість (тобто кількість точок на одиницю виміру кута).

Метод «Об'єм». Цей метод використовує підхід, описаний у [3]. Нехай $\{A_1, A_2, \dots, A_k\}$ – довільна скінченна сукупність точок в n -вимірному евклідовому просторі E_n , які відокремлені деякою гіперплощиною вигляду (2) і координати кожної точки A_i задовольняють нерівність (3). Розглянемо $\vec{r}_i = \overrightarrow{OA_i}$ – радіус-вектор точки A_i , де O – початок системи координат. З множини $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k\}$ виберемо лінійно незалежні підсистеми максимальної розмірності. Відомо [4], що ці підсистеми векторів складаються з одного й того ж числа векторів. Нехай $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_s\}$ одна з таких підсистем ($1 \leq s \leq k$). Сумістивши ці вектори з початком системи координат O , дістанемо так званий s -вимірний паралелепіпед. Число, яке дорівнює квадратному кореню від визначника Грама з цих векторів, має властивості об'єму. Нагадаємо [5], що число, співставлене з кожною областю простору E_n , буде об'ємом тоді і тільки тоді, коли конгруентним областям відповідають рівні числа і області, яка складається з двох областей, відповідає число, що дорівнює сумі чисел, відповідних цим двом областям. Позначаючи об'єм паралелепіпеда символом V_s , матимемо:

$$V_s^2 = \begin{vmatrix} \overrightarrow{r_1 r_1} & \dots & \overrightarrow{r_1 r_s} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \overrightarrow{r_s r_1} & \dots & \overrightarrow{r_s r_s} \end{vmatrix} = g.$$

Відомо, що $g \neq 0$ тоді і тільки тоді, коли вектори $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_s$ лінійно незалежні (g називається визначником Грама).

Нехай $\{B_i^s = \overrightarrow{r_{i1}}, \dots, \overrightarrow{r_{is}}\}$ – сукупність всіх максимальних лінійно незалежних підсистем системи векторів $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k\}$. Тоді V_i^s об'єм s -вимірного паралелепіпеда, побудованого на s векторах з множини векторів

$$\overline{B_i^s} = \left\{ \frac{\overrightarrow{r_{i1}}}{\|\overrightarrow{r_{i1}}\|}, \dots, \frac{\overrightarrow{r_{is}}}{\|\overrightarrow{r_{is}}\|} \right\}.$$

Позначимо через t_i^s сукупність векторів із $\{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_k\}$, які лінійно виражаються через вектори $\overline{B_i^s}$ з невід'ємними коефіцієнтами і знайдемо

відношення $\rho_i^s = \frac{|t_i^s|}{V_i^s}$, де $|t_i^s|$ – число векторів з t_i^s . Виберемо ті

паралелепіпеди, для яких ρ_i^s приймає найбільше значення. Таких паралелепіпедів може бути декілька. Якщо для різних систем об'єми $V_i^s = V_h^s$ співпадають, то вибираємо той паралелепіпед, для якого ρ_i^s більше від ρ_h^s .

На основі описаних методів побудовано відповідні алгоритми.

Висновки. Виходячи з вищеприведених підходів, можна зробити наступні узагальнення. Дані методи дозволяють відокремити певну сукупність точок у просторі E_n , координати яких можуть відповідати векторам, сполученим з початком координат. Ці вектори можна розглядати як вектор-градієнти певних цільових функцій, за допомогою яких моделюються критерії ефективності у задачах вибору. Таким чином, послідовно застосовувавши до множини критеріїв ефективності один із цих методів, існує можливість побудови групи критеріїв з подальшим їх згортанням і, цим самим, зменшення критеріальної розмірності задачі вибору. Загальна схема такого алгоритму буде мати наступний вигляд:

0-й крок. Задається множина критеріїв ефективності, які описуються цільовими функціями f_i ($i=1, \dots, k$), початки вектор-градієнтів яких перенесені у початок координат і координати цих векторів відомі.

p-й крок. З деякої підмножини критеріїв ефективності утворюється група за одним із методів, яка відокремлюється. Для множини критеріїв, що залишились, знову повторюється *p – крок*. Алгоритм закінчує свою роботу, якщо підмножина критеріїв, що залишається, є прийнятною для особи, що приймає рішення.

Література

1. Баранник В.Ф., Маляр М.М. Критерії ефективності та їх протирічливість // Наук.-техн. зб. "Проблеми економічного та соціального розвитку регіону і практика наукового експерименту". Вип. 13. – Київ-Ужгород, 1997.-С. 253-255.
2. Баранник В.Ф., Маляр М.М. Пониження порядку в багатокритеріальній оптимізації // Наук.-техн. зб. "Проблеми економічного та соціального розвитку регіону і практика наукового експерименту". Вип. 14. – Київ-Ужгород, 1998.-С. 219-220.
3. Баранник В.Ф., Маляр М.М. Зменшення кількості критеріїв ефективності // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки, вип.4, Київ, 2001.-С.345-348.
4. Курош А. Г. Курс высшей алгебры. – М.: Наука, 1971.- 432 с.
5. Завало С.Т., Костарчук В.М., Хацет Б.І. Алгебра і теорія чисел. ч. 2. – К: Вища школа, 1976.- 384 с.

Надійшла до редакції 16.01.2006

УДК 518.9

Сергій О. Машченко¹,

Sergey O. Mashchenko¹,

Слабкі індивідуально-
оптимальні рівноваги

A weak individually-optimum
equilibria

Пропонується нова концепція
оптимальності в іграх за умов
повної інформованості гравців.

Ключові слова: рівновага за
Нешем, оптимальність за
Парето, коаліційні рівноваги.

A new conception of a games
optimum in the conditions of the
complete being of players inform is
offered.

Key words: the Nesh's equilibria, the
Pareto optimum, coalition equilibria.

¹E-mail: msomail@yandex.ru

Розглянемо гру G у нормальній формі $(X_i, u_i; i \in N)$, де $N = \{1, 2, \dots, n\}$ - множина з n гравців; X_i - множина стратегій i -го гравця; $u_i(x)$ - функція виграшу i -го гравця, 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 своєї функції виграшу.

Найбільш привабливими концепціями оптимальності в умовах повної інформованості гравців є оптимальність за Парето та за Нешем [1].

Концепція оптимальності за Парето базується на так званих сильній та слабкій аксіомах Парето [2]. Кажуть, що вектор виграшу гравців $U_N(x) = (u_i(x))_{i \in N}$ у ситуації x гри G домінує вектор виграшу $U_N(y)$ у ситуації y і позначають це через $U_N(x) \succ U_N(y)$, якщо $u_i(x) \geq u_i(y), \forall i \in N$ та хоч одна нерівність є строгою, тобто $\exists j \in N : u_j(x) > u_j(y)$.

За слабкою аксіомою Парето вектор виграшу гравців $U_N(x) = (u_i(x))_{i \in N}$ в ситуації x гри G сильно домінує вектор виграшу $U_N(y)$ в ситуації y і позначають це через $U_N(x) \succ \succ U_N(y)$, якщо $u_i(x) > u_i(y), \forall i \in N$.

Ситуація x^* гри G називається оптимальною за Парето (множину цих ситуацій будемо позначати через $PO(G)$), якщо не існує ситуації, яка б її домінувала, тобто $x^* \in PO(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X : U_N(x) \succ U_N(x^*)$. (1)

Ситуація x^* гри G називається слабо оптимальною за Парето (оптимальною за Слейтером, множину цих ситуацій будемо позначати через $SO(G)$), якщо не існує ситуації, яка б її сильно домінувала, тобто

$$x^* \in SO(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X : U_N(x) \succ \succ U_N(x^*). \quad (2)$$

“Коллективна оптимальність” сильної (слабкої) Парето-оптимальної ситуації є запорукою того, що для усіх гравців знайти якусь кращу (сильно кращу) ситуацію неможливо. Умови існування Парето-оптимальних ситуацій є досить “слабкими” і, грубо кажучи, зводяться до умов існування максимумів функцій виграшу гравців (скінченність множин стратегій гравців або компактність множин стратегій гравців та неперервність їх функцій виграшу). Оскільки таких ситуацій, як правило не одна [2], то виникає питання – яку вибрати? В одних Парето-оптимальних ситуаціях більший виграш можуть мати одні гравці, в інших – інші гравці. Тому угоди, які базуються на них, є “нестійкими” щодо відхилень гравців від узгоджених стратегій.

Концепція рівноважності за Нешем, базується на принципі “власної оптимальності”. Ситуація x^* називається рівновагою за Нешем (множину цих ситуацій будемо позначати через $NE(G)$), якщо: $\forall i \in N$

$$u_i(x^*) \geq u_i(x_i, x_{N \setminus i}^*), \forall x_i \in X_i \text{ або } \neg \exists x_i \in X_i : u_i(x_i, x_{N \setminus i}^*) > u_i(x^*). \quad (3)$$

З цього визначення випливає, що дана ситуація є рівновагою Неша, якщо від неї не вигідно відхилитись будь-якому одному гравцю (усі інші свої стратегії не змінюють), оскільки значення його функції виграшу не покращується (є оптимальним для кожного гравця).

Якщо гравці заключають угоду про свою майбутню поведінку та її основою є Нешівська рівновага, то власна оптимальність є запорукою “стабільності” вибраної ситуації. “Ціною” привабливості Нешівських рівноваг є серйозні проблеми, які пов’язані з їх існуванням, складністю знаходження, проблемою вибору єдиної рівноваги [3].

Одним із загально прийнятих шляхів подолання проблеми неіснування Нешівських рівноваг є організація гравців у коаліції. У цьому випадку природним узагальненням “індивідуальної” стає коаліційна Нешівська рівновага. Оскільки у коаліційній грі виграш коаліції гравців визначається виграшами усіх членів коаліції, то визначення в даному випадку поняття переваги однієї ситуації над іншою базується також на аксіомах Парето.

Нехай $Q = \{N(k)\}_{k \in K}$ деяке розбиття множини гравців на коаліції $N(k) \subseteq N, k \in K$; $N(i) \cap N(j) = \emptyset, i \neq j$; $\bigcup_{k \in K} N(k) = N$. Тоді, якщо

використовують слабку аксіому Парето, то ситуація x^* називається сильною коаліційною рівновагою за Нешем у грі G , якщо:

$$\forall k \in K \quad \neg \exists x_{N(k)} \in X_{N(k)} : U_{N(k)}(x_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)}^*) > U_{N(k)}(x_{N(k)}^*, x_{N \setminus N(k)}^*), \quad (4)$$

де $X_{N(k)} = \prod_{i \in N(k)} X_i, k \in K$, - множини коаліційних стратегій гравців;

$U_{N(k)}(x) = (u_i(x))_{i \in N(k)}, k \in K$, - вектори функцій виграшу коаліцій. Будемо позначати множину цих рівноваг у грі G через $SKNE_Q(G)$.

Аналогічно за сильною аксіомою Парето, визначається множина $WKNE_Q(G)$ слабких коаліційних рівноваг за Нешем у грі G : $WKNE_Q(G) \Leftrightarrow \Leftrightarrow \forall k \in K, \neg \exists x_{N(k)} \in X_{N(k)} : U_{N(k)}(x_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)}^*) \succ U_{N(k)}(x_{N(k)}^*, x_{N \setminus N(k)}^*)$. (5)

Розглянемо граничні випадки. Якщо коаліція одна ($|K|=1$), тобто вона співпадає з множиною усіх гравців N , то множина коаліційних рівноваг за Нешем буде множиною оптимальних за Парето ситуацій у грі G . Якщо коаліцій стільки, скільки є гравців ($|K|=n$), тоді $N(i) = \{i\}$, $i \in N$, а множина коаліційних рівноваг за Нешем буде множиною рівноважних за Нешем ситуацій у грі G .

У коаліційній рівновазі принцип "власної оптимальності" замінюється вже іншим принципом "коаліційної оптимальності", який полягає у виборі коаліцією сумісних коаліційних стратегій та у формуванні коаліційної цілі. Якщо у грі G не існує Нешівських рівноваг, то при досить слабких припущеннях (саме таких, які потрібні для існування Парето-оптимальних ситуацій) завжди знайдеться таке розбиття множини гравців на коаліції (у гіршому випадку це буде одна коаліція, яка співпадає з усією множиною гравців N), коли множина коаліційних рівноваг буде непорожньою. Хоча заміна принципу "власної оптимальності" на "коаліційну оптимальність" збільшує "шанси" на існування рівноваг, з іншої сторони "стабільність" цих рівноваг суттєво зменшується з укрупненням коаліцій.

На практиці, наприклад, у Парламенті, процес розподілу гравців на коаліції відбувається імперично. Методом проб та помилок створюються та руйнуються ті чи інші коаліції. Критерієм істинності у такому процесі є стабільність Парламентських угод. У теорії, формулюються досить складні комбінаторно-ігрові задачі, наприклад [4], які дозволяють знайти "оптимальний" у тому чи іншому розумінні склад коаліцій.

Порівняльний аналіз розглянутих вище принципів оптимальності показує, що вони відрізняються як рівнем агрегації стратегій (від власних стратегій через коаліційні стратегії до колективних стратегій всієї множини гравців), так одночасно і рівнем толерантності гравців. У Нешівських рівновагах толерантність гравців мінімальна, оскільки кожен враховує лише власні інтереси. У коаліційних рівновагах вона збільшується, оскільки кожен враховує інтереси членів своєї коаліції. У Парето-оптимальних ситуаціях толерантність гравців максимальна, оскільки кожен враховує інтереси усіх.

У цій роботі пропонується використати принцип "індивідуальної оптимальності", який буде узагальненням принципу "власної оптимальності" у напрямі збільшення толерантності гравців до рівня відповідного "колективній оптимальності", що приводить до урахунку кожним гравцем функцій виграшу усіх інших гравців при виборі власних стратегій.

Припустимо, що кожен гравець вибирає свої стратегії незалежно від

інших, але враховує при цьому функції виграшу усіх інших гравців. Сформулюємо поняття індивідуально-оптимальної рівноваги.

Спочатку уведемо спеціальне відношення домінування, яке будемо називати відношенням домінування Неша.

Будемо казати, що ситуація x гри G з вектором виграшу $U_N(x) = (u_i(x))_{i \in N}$ домінує (сильно домінує) за Нешем ситуацію y з вектором виграшу $U_N(y)$ в та будемо позначати це через $x \succ y$ ($x \succ \succ y$), якщо y дістається із ситуації x зміною якимсь, але одним гравцем $i \in N$, своєї власної стратегії, тобто $y = (y_i, x_{-i})$ та $U_N(x) \succ U_N(y)$, тобто:

$$x \succ y \Leftrightarrow \exists i \in N: U_N(x_i, x_{-i}) \succ U_N(y_i, x_{-i})$$

$$(x \succ \succ y \Leftrightarrow \exists i \in N: U_N(x_i, x_{-i}) \succ \succ U_N(y_i, x_{-i})).$$

Ситуацію x^* будемо називати сильною індивідуально-оптимальною рівновагою, а їх множину будемо позначати через $SIOE(G)$, якщо не існує іншої ситуації, яка б домінувала її за Нешем, тобто

$$x^* \in SIOE(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X: x \succ x^*.$$

Відповідно до відношення сильного домінування за Нешем визначимо поняття слабкої індивідуально-оптимальної рівноваги. Ситуацію x^* будемо називати слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою (їх множину будемо позначати через $WIOE(G)$), якщо не існує іншої ситуації, яка б сильно домінувала її за Нешем, тобто

$$x^* \in WIOE(G) \Leftrightarrow \neg \exists x \in X: x \succ \succ x^*.$$

Застосування індивідуально-оптимальних рівноваг мотивується наступним сценарієм гри. До початку гри гравці складають 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 приймають рішення про вибір своєї стратегії. У тому і тільки тому випадку, якщо основою угоди буде сильна (слабка) індивідуально-оптимальна рівновага, i -му гравцю, окремо, буде не вигідно вибирати іншу стратегію ніж x_i^* , $i \in N$, оскільки виграш свій та інших гравців, чий інтереси він враховує, не покращиться (сильно не покращиться). Лояльність (а може сподівання, що інші гравці поділяться виграшем) кожного гравця по відношенню до інших, буде запорукою стабільності такої угоди.

У цій роботі далі ми будемо детально досліджувати слабкі індивідуально-оптимальні рівноваги.

Цікаво розглянути слабкі індивідуально-оптимальні рівноваги у граничних випадках, а також порівняти їх з оптимальними за Парето, Нешівськими та коаліційними рівновагами.

Теорема 1. Мають місце включення : $PO(G) \subseteq SO(G) \subseteq WIOE(G)$;
 $NE(G) \subseteq WIOE(G)$; $SKNE_Q(G) \subseteq WKNE_Q(G) \subseteq WIOE(G)$.

Доведення. Включення $PO(G) \subseteq SO(G)$ елементарно виводиться з визначень (1),(2) та є відомим [2]. Доведемо включення $SO(G) \subseteq WIOE(G)$. Нехай $x^* \in SO(G) \neq \emptyset$. Припустимо супротивне, що $x^* \notin WIOE(G)$. Тоді $\exists i \in N$, $\exists x_i \in X_i$: $U_N(x_i, x_{N \setminus i}^*) \succ \succ U_N(x_i^*, x_{N \setminus i}^*)$. Звідси випливає, що при наймі для $y = (x_i, x_{N \setminus i}^*)$, $U_N(y) \succ \succ U_N(x^*)$. Отримуємо суперечність з (2).

Доведемо включення $NE(G) \subseteq WIOE(G)$. Нехай $x^* \in NE(G) \neq \emptyset$. Припустимо супротивне, що $x^* \notin WIOE(G)$. Тоді $\exists i \in N$, $\exists x_i \in X_i$: $U_N(x_i, x_{N \setminus i}^*) \succ \succ U_N(x_i^*, x_{N \setminus i}^*)$. Звідси, випливає що $u_i(x_i, x_{N \setminus i}^*) > u_i(x^*)$. Звідси за визначенням (3) $x^* \notin NE(G)$. Одержали суперечність.

Нехай $Q = \{N(k)\}_{k \in K}$ деяке розбиття множини гравців на коаліції $N(k) \subseteq N, k \in K$; $N(i) \cap N(j) = \emptyset, i \neq j$; $\bigcup_{k \in K} N(k) = N$.

Включення $SKNE_Q(G) \subseteq WKNE_Q(G)$ елементарно виводиться з визначень (4),(5) та є відомим [2]. Доведемо включення $KNE_Q(G) \subseteq IOE_Q(G)$. Нехай $x^* \in KNE_Q(G)$. Припустимо супротивне, що $x^* \notin WIOE(G)$. Тоді $\exists i \in N$, $\exists x_i \in X_i$: $U_N(x_i, x_{N \setminus i}^*) \succ \succ U_N(x_i^*, x_{N \setminus i}^*)$. Візьмемо коаліцію $N(k)$, до якої належить i -й гравець. Позначимо через $y_{N(k)} = (x_i, x_{N(k) \setminus i}^*)$. Звідси випливає, що $u_j(y_{N(k)}, x_{N \setminus N(k)}^*) > u_j(x^*) \forall j \in N(k)$. За визначенням (5) одержимо $x^* \notin KNE_Q(G)$. Одержали суперечність. ♦

При досить слабких припущеннях щодо умов гри (скінченність множин стратегій гравців; або компактність множин стратегій гравців та неперервність їх функцій виграшу) $SO(G) \neq \emptyset$, тому $WIOE(G) \neq \emptyset$. З теореми 1 також видно, що

$$WIOE(G) \supseteq NE(G) \cup SKNE_Q(G) \cup WKNE_Q(G) \cup PO(G) \cup SO(G).$$

За побудовою розглянутих множин рівноваг очевидно, що найбільш "стабільними" є Нешівські рівноваги, якщо вони існують, а найбільш вразливими, щодо порушення угоди, є слабкі Парето-оптимальні ситуації, інші займають проміжні місця. Оскільки усі розглянуті вище рівноваги є індивідуально оптимальними, тому для пошуку найбільш стабільної з існуючих рівноваг спробуємо параметрично описати множину індивідуально-оптимальних рівноваг.

Теорема 2. Нехай без обмеження загальності функції виграшу усіх гравців в ситуації x^* приймають додатні значення, тобто $u_i(x^*) > 0, i \in N$. Ситуація x^* буде слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою тоді і тільки тоді, коли існують вектори параметрів

$$\mu_i \in M_i^+ = \left\{ \mu_i = (\mu_i^j)_{j \in N} \mid \sum_{j \in N} \mu_i^j = 1; \mu_i^j > 0, j \in N \right\}, i \in N \quad (6)$$

такі, що ситуація x^* буде рівновагою Неша в наступній параметричній грі:

$$G(\mu) = (X_i, \min_{j \in N} \mu_i^j u_j(x); i \in N). \quad (7)$$

Доведення. Доведемо достатність. Нехай x^* - рівновага Неша у параметричній грі (6) при деяких значеннях параметрів $\mu_i \in M_i^+, i \in N$. Звідси випливає, що для будь-якого гравця $i \in N$ і будь-якої стратегії $x_i \in X_i$ мають місце нерівності: $\min_{j \in N} \mu_i^j u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) \leq \mu_i^k u_k(x^*), \forall k \in N$, тому існує такий гравець $j \in N$, що $u_j(x^*) \geq u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*), \forall x_i \in X, \forall i \in N$. Отже $\neg \exists x = (x_i, x_{N \setminus i}^*) \in X : x \succ_{NE} x^*$. Звідси x^* буде слабкою індивідуально-оптимальною рівновагою.

Доведемо необхідність. Для цього візьмемо вектор $\bar{\mu}_i, i \in N$ з компонентами, які визначені за наступними формулами:

$$\bar{\mu}_i^j = \lambda_i / u_j(x^*), j \in N; \lambda_i = 1 / \sum_{k \in N} \frac{1}{u_k(x^*)}, i \in N.$$

Відзначимо, що $\bar{\mu}_i \in M_i^+, i \in N$. З того, що x^* - слабка індивідуально-оптимальна рівновага слідує, що $\neg \exists x \in X : x \succ_{NE} x^*$, тобто $\exists i \in N, \exists j \in N : u_j(x^*) \geq u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*)$, а значить, $\bar{\mu}_i^j u_j(x^*) \geq \bar{\mu}_i^j u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*)$. Оскільки $\bar{\mu}_i^j u_j(x^*) = \lambda_i = 1 / \sum_{k \in N} \frac{1}{u_k(x^*)} = const$, то будь-якого гравця $i \in N$ і для будь-якої стратегії $x_i \in X_i$ мають місце нерівності: $\min_{j \in N} \bar{\mu}_i^j u_j(x_i, x_{N \setminus i}^*) \leq \bar{\mu}_i^k u_k(x^*), \forall k \in N$. Тому x^* - рівновага за Нешем параметричної гри (6). ♦

Теорема 2 дає можливість конструктивно описати множини $NE(G), WKNE_Q(G), SO(G), WIOE(G)$ як розв'язки параметричної гри наступним чином.

1) $x^* \in NE(G) \Leftrightarrow x^* \in NE(G(\mu))$ при $\mu_i^j \rightarrow 0; \mu_i^j \rightarrow 1, \forall j \neq i; i \in N$. Оскільки величина $1/\mu_i^j, 1/\mu_i^j \in (1, \infty)$, характеризує пріоритет функції виграшу j -го гравця у перевазі i -го на множині усіх гравців, вказані умови означають, що кожного гравця цікавить лише власний виграш, виграші інших він не враховує.

2) $x^* \in WKNE_Q(G) \Leftrightarrow x^* \in NE(G(\mu))$ при $\mu_i^k \rightarrow 0, \forall k \in N(k_i); \mu_i^j \rightarrow 1, \forall j \in N \setminus N(k_i); i \in N$, де $N(k_i)$ - коаліція, до якої належить i -й гравець, $i \in N$. Тут кожного гравця цікавить лише виграш членів його

коаліції, виграти інших він не враховує.

3) $x^* \in SO(G) \Leftrightarrow x^* \in NE(G(\mu))$ при $\mu_j^i = \mu_k^i, \forall j, k \in N; i \in N$. У цьому випадку кожен гравець враховує інтереси усіх інших, але пріоритети всіх гравців по відношенню до i -го однакові, $i \in N$.

4) $x^* \in WIOE(G) \Leftrightarrow x^* \in NE(G(\mu))$ при довільних векторах параметрів $\mu_i \in M_i^+, i \in N$. У цьому випадку кожен гравець враховує інтереси усіх інших з довільними пріоритетами.

Особливу роль відіграють параметри $\mu_i^i, i \in N$, які характеризують пріоритет $1/\mu_i^i \in (1, \infty)$ власної функції виграшу гравця по відношенню до функцій виграшу інших гравців. Припустимо для простоти дослідження, що пріоритети функцій виграшу усіх гравців, з якими рахується i -й для нього однакові та множини $NE(G), WKNE_\varphi(G), SO(G), WIOE(G)$ непорожні. Тоді при $\mu_i^i \rightarrow 0, \forall i \in N$, одержимо $NE(G) = NE(G(\mu))$. При більшому значенні $\mu_i^i = \varepsilon |N(k_i)|, \forall i \in N$, де $\varepsilon \rightarrow 0$, а k_i - номер коаліції, до складу якої входить i -й гравець, одержимо $WKNE_\varphi(G) = NE(G(\mu))$, причому чим більше коаліція, тим більший ваговий коефіцієнт μ_i^i та відповідно менший пріоритет власного критерію гравця i . При ще більшому значенні $\mu_i^i = \varepsilon |N|, \forall i \in N, \varepsilon \rightarrow 0$, будуть ще більші вагові коефіцієнти $\mu_i^i, i \in N$ та відповідно менші пріоритети власних критеріїв гравців і ми одержимо $SO(G) = NE(G(\mu))$. На основі цієї оцінки можна висунути гіпотезу, що величина пріоритету $1/\mu_i^i$ власної функції виграшу характеризує ступінь "індивідуальності" для i -го гравця індивідуально-оптимальної рівноваги, а обернена до пріоритету $1/\mu_i^i$ величина μ_i^i характеризує толерантність i -го гравця по відношенню до інших. Тому меншій толерантності усіх гравців відповідає більший рівень "стабільності" ситуації (рівновага Неша), більшій толерантності – менший рівень (Парето-оптимальність).

Ці міркування приводять до думки, що кожную ситуацію $x \in X$ можна оцінити мінімально можливим рівнем толерантності усіх гравців необхідним й достатнім для того, щоб вона була індивідуально-оптимальною рівновагою. Ця оцінка буде оцінкою рівня "стабільності" цієї рівноваги.

Для довільної ситуації $x \in X$ та гравця $i \in N$ сформулюємо наступну оптимізаційну задачу відносно вагових коефіцієнтів $\mu_j^i; j \in N$, у якій ситуація $x \in X$ виступає у ролі параметру:

$$\mu^{\min}(x) = \min_{\mu} \max_{j \in N} \mu_j^i, \quad (8)$$

$$\min_{j \in N} \mu_i^j u_j(x) \geq \min_{j \in N} \mu_i^j u_j(y_i, x_{-i}), y_i \in X_i, i \in N \quad (9)$$

$$\sum_{j \in N} \mu_i^j = 1; \mu_i^j \geq 0; i, j \in N. \quad (10)$$

Обмеження (9) описують за визначенням (3) умови існування Нешівської рівноваги для параметричної гри $G(\mu)$. Обмеження (10) забезпечують умову $\mu_i \in M_i^+, i \in N$. На підставі теореми 2 $x \in WIOE(G)$, тоді й тільки тоді, коли система обмежень (9),(10) буде сумісною. Якщо ситуація $x \notin WIOE(G)$, будемо вважати $\mu^{\min} = 1$. Величина $\mu^{\min}(x)$ буде мінімально гарантованим рівнем толерантності усіх гравців достатнім для того, щоб ситуація $x \in X$ була індивідуально-оптимальною рівновагою, і буде оцінкою рівня її "стабільності".

Відображення $\mu^{\min} : X \rightarrow [0,1]$ будемо далі називати критерієм толерантності. Індивідуально-оптимальна рівновага x^* гри G , яка забезпечує $\min_{x \in WIOE(G)} \mu^{\min}(x)$, тобто мінімізує критерій толерантності, може бути рекомендована гравцям як основа для стабільної угоди.

Цей підхід є особливо актуальним, коли у грі G не існує рівноваг за Нешем. Тоді x^* буде "найбільш стабільною" індивідуально-оптимальною рівновагою (можливо коаліційна рівновага, можливо Парето-оптимальна).

Слід зауважити, що поняття стабільності рівноваг є досить складним та багатоаспектним (більш менш у повній мірі воно досліджене у роботах лауреатів Нобелівської премії з економіки за 1994 рік Дж. Харшанї та Р. Зельтеном [2]) і пов'язано, в основному, з вибором єдиної рівноваги з множини рівноваг Неша за критеріями ефективності за вииграшем та ефективності за ризиком. Описаний вище підхід пропонує нову (більш широку) модель вибору рівноваг з можливістю використання наряду з критеріями ефективності за вииграшем та ризиком критерію толерантності.

Література.

1. Мулен Э. Теория игр с примерами из математической экономики. — М.: Мир, 1985.
2. Подиновский В.В., Ногин В.Д. Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. — М.: Наука, 1982.
3. Харшаньи Дж., Зельтен Р. Общая теория выбора равновесия в играх. — Санкт-Петербург: Экономическая школа, 2001.
4. Бухтояров С.Е., Емеличев В.А. Конечные коалиционные игры: параметризация принципа оптимальности ("от Парето до Неша") и устойчивость обобщенно эффективных ситуаций // Докл. НАН Беларуси. — 2002. — 46, N6. — С.36-38.

Надійшла до редакції 22.03.2006

УДК 517.929

Михайло Меркур'єв

Про один підхід до
визначення інтегралу за
процесом нечіткого блукання

Знайдено альтернативний
спосіб доведення коректності
означення інтегралу за процесом
нечіткого блукання. Визначений
розподіл цього інтегралу для деяких
випадків.

Ключові слова: нечіткий
процес, теорія можливостей,
інтеграл за процесом нечіткого
блукання

Mihail Mercuriev

One approach to defining
integral by a process of fuzzy roaming

An alternative proof of
correctness of integral by a fuzzy
roaming process is found. Distribution
of this integral for some cases is
calculated.

Keywords: fuzzy process, theory
of possibilities, integral by a process of
fuzzy roaming

В [1] був визначений інтеграл за процесом нечіткого блукання. Визначення цього інтегралу дозволяє ввести диференціальне рівняння за процесом нечіткого блукання. Дана робота наводить кілька прикладів з обчислення інтегралу за процесом нечіткого блукання, а також альтернативне обґрунтування правильності його введення.

Нехай (X, A) – вимірний простір, A – σ -алгебра на X . Основні властивості простору можливостей див. [2].

Означення 1. Послідовність нечітких величин ξ_n збігається до нечіткої величини ξ з необхідністю 1 ($N\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$), якщо для будь-якого $x \in X$, для якого $P(\{x\}) \neq 0$, $\xi_n(x) \rightarrow \xi(x)$.

У цьому випадку, дійсно, $N\{\xi_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \xi\} = 1$.

Означення 2. Послідовність нечітких величин ξ_n збігається до нечіткої величини ξ за можливістю ($P\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$), якщо для будь-якого $c > 0$
 $P\{\xi_n - \xi > c\} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$.

Очевидно, що границя з необхідністю 1, якщо вона існує, єдина у такому сенсі: якщо є дві границі $N\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$ та $N\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \bar{\xi}$, то для будь-якого $x \in X$, для якого $P(\{x\}) \neq 0$, $\xi(x) = \bar{\xi}(x)$. Покажемо, що для границі за можливістю також виконується ця властивість. Дійсно, нехай $P\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$ та $P\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \bar{\xi}$, причому існує таке $x \in X$, для якого $P(\{x\}) = \alpha > 0$ та $\xi(x) \neq \bar{\xi}(x)$. Візьмемо $c < \frac{1}{2}|\xi(x) - \bar{\xi}(x)|$. Тоді для будь-якого n або $|\xi_n(x) - \xi(x)| > c$, або $|\xi_n(x) - \bar{\xi}(x)| > c$, тобто

$P(\{|\xi_n - \xi| > c\} \cup \{|\xi_n - \bar{\xi}| > c\}) \geq \alpha$ для будь-якого n . Приходимо до суперечності: або $P\{|\xi_n - \xi| > c\} \rightarrow 0$, або $P\{|\xi_n - \bar{\xi}| > c\} \rightarrow 0$.

Лема 1. Із збіжності за можливістю випливає збіжність з необхідністю 1.

Доведення. Припустимо, що не виконується означення збіжності з необхідністю 1, тобто існує $x \in X: P(\{x\}) > 0; \xi_n \not\rightarrow \xi$. З послідовності ξ_n можна вибрати підпослідовність ξ_{n_k} таку, що $|\xi_{n_k}(x) - \xi(x)| > \varepsilon$. Поклавши $c = \varepsilon$, одержуємо, що для $n = n_k \rightarrow \infty$ $P\{|\xi_n - \xi| > c\} \geq P(\{x\}) > 0$.

Зауваження. В теорії ймовірностей є аналогічні типи збіжності – з ймовірністю 1 та за ймовірністю. Але в ній, навпаки, із збіжності за з ймовірністю 1 випливає збіжність за ймовірністю.

Наведемо приклад, який показує, що зворотне твердження невірне. Розглянемо таку можливісну модель: $X = N; P(\{x\}) = 1; \xi_n = \begin{cases} 0; n > x \\ 1; n \leq x \end{cases}$. Для неї $N\lim \xi_n = 0; P\lim \xi_n$ не існує.

Лема 2. Якщо $N\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$ та для будь-якого $\alpha \in (0,1]$ послідовність $\xi_n(x)$ збігається до $\xi(x)$ на множині $[X]_\alpha = \{x \in X: P(\{x\}) \geq \alpha\}$ рівномірно за x , то $P\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$. І навпаки, якщо $P\lim_{n \rightarrow \infty} \xi_n = \xi$, то для будь-якого $\alpha \in (0,1]$ на множині $[X]_\alpha$ послідовність $\xi_n(x)$ збігається до $\xi(x)$ рівномірно за x .

Доведення. За означенням рівномірної збіжності, для будь-якого $\alpha > 0$ та для будь-якого $c > 0$ існує індекс $n(\alpha, c) \in N$ з такою властивістю: якщо $n' > n(\alpha, c)$ та $P(\{x\}) \geq \alpha$, то $|\xi_{n'}(x) - \xi(x)| \leq c$. Тоді можливість того, що різниця між ξ_n та ξ перевищує c , можна оцінити так:

$$P\{|\xi_n - \xi| > c\} \leq \sup\{\alpha: n \leq n(\alpha, c)\} \equiv \alpha(n, c).$$

Покажемо, що $\alpha(n, c) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Припустимо супротивне: $\alpha(n, c) \not\rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Тоді існує таке α_0 , що для деякої послідовності індексів $n_k \rightarrow \infty$ виконується $n_k \leq n(\alpha_0, c)$, що неможливо, оскільки $n(\alpha_0, c)$ скінченне. Пряме твердження доведено.

Доведемо зворотне твердження. Припустимо протилежне: існують такі $c > 0$ та $\alpha > 0$, що для будь-якого номера k існує елемент нечіткого простору x та номер $n_k > k$, для якого $P\{x\} \geq \alpha$ та $|\xi_{n_k}(x) - \xi(x)| > c$. Тоді існує послідовність $n_k \rightarrow \infty$ така, що $P\{|\xi_{n_k} - \xi| > c\} \geq P(\{x\}) \geq \alpha$, тобто збіжності за можливістю нема.

Означення 3 [3]. Нечітку величину ξ (скалярну або векторну) назовемо нормальною, якщо її розподіл має вигляд

$$\mu_\xi(u) = \Phi\left\{\Xi^{-1/2}(u - u_0)\right\}^2,$$

де $\Phi(x)$ – монотонно спадна функція, що задана при $x \geq 0$ і така, що $\Phi(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0, \Phi(0) = 1; \Xi$ – додатно визначена матриця.

Означення 4. Нечітким процесом називається функція $\xi(x, t): X \times R \rightarrow Y$.

Означення 5 [3]. Нечіткий процес $w(t)$ називається процесом нечіткого блукання, якщо він:

1. З незалежними приростами, тобто для будь-яких моментів часу

$$= \left[- \int_0^{\varphi^{-1}(\alpha)} f(t) dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)}, \int_0^{\varphi^{-1}(\alpha)} f(t) dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} \right]$$

Ми обчислили розподіл інтегралу для будь-якої кусково-постійної функції. Це дозволить довести лему про збіжність інтегралу іншим чином.

Лема 4 [1]. Нехай послідовність кусково-постійних функцій $f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ у середньому. Тоді $\int_0^T f_n(t) dw(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$ за можливістю.

Доведення. Оскільки $\int_0^T f_n(t) dt \rightarrow 0$, а $\varphi(u)$ спадає до 0, то для будь-якого $\varepsilon \in (0,1)$ існує таке n_1 , що $\forall n > n_1$, $\int_0^T f_n(t) dt < \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varphi^{-1}(\varepsilon)}}$. Тоді за лемою 3 $\forall n > n_1$,

$$P \left\{ \int_0^T f(t) dw(t) \in [-\varepsilon; \varepsilon] \right\} \leq \varepsilon.$$

З цієї леми випливає така теорема:

Теорема 1 [1]. Нехай задано кусково-неперервну функцію $f(t)$, до якої збігаються у середньому дві послідовності кусково-постійних функцій $f_n(t)$ й $\bar{f}_n(t)$ та існує границя за можливістю $Q = P \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t) dw(t)$. Тоді існує границя

$$\bar{Q} = P \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T \bar{f}_n(t) dw(t) \text{ і } \bar{Q} = Q.$$

Теорема показує коректність такого означення:

Означення 7. Нехай f вимірна за Лебегом функція та до неї збігається в середньому послідовність кусково-постійних функцій $f_n(t)$ ($\int_0^T f_n(t) - f(t) dt \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$). Якщо послідовність $\int_0^T f_n(t) dw(t)$ збігається за можливістю, назвемо її границю інтегралом від вимірної функції за процесом нечіткого блукання.

$$\int_0^T f(t) dw(t) = P \lim_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t) dw(t). \quad (3)$$

Означення 8. Послідовність функцій $a_n(x)$ називається фундаментальною рівномірно за x , якщо для будь-якого $\varepsilon > 0$ існує таке n_0 що не залежить від x , що при $m > n \geq n_0$ $|a_n(x) - a_m(x)| < \varepsilon$.

Лема 5. Якщо послідовність функцій $a_n(x)$ фундаментальна рівномірно за x (для будь-якого $\varepsilon > 0$ існує таке n_0 що не залежить від x , що при $m > n \geq n_0$ $|a_n(x) - a_m(x)| < \varepsilon$), то вона рівномірно збіжна.

Доведення. Позначимо $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n(x) = a(x)$. З рівномірної фундаментальності для будь-якого $\varepsilon > 0$ існує таке n_0 , що при $m > n \geq n_0$ виконується $|a_n - a_m| < \frac{\varepsilon}{2}$. Тоді для всіх $m \geq n_0$ $a_m \in [a_{n_0} - \frac{\varepsilon}{2}, a_{n_0} + \frac{\varepsilon}{2}]$, тому $a(x) \in [a_{n_0} - \frac{\varepsilon}{2}, a_{n_0} + \frac{\varepsilon}{2}]$. Звідси $|a(x) - a_n(x)| < \varepsilon$.

що доводить рівномірну збіжність.

Лема 6. Для детермінованої інтегрованої за Лебегом функції $f(t)$ також виконується (2).

Доведення. Як відомо з теорії функцій дійсної змінної, знайдеться послідовність кусково-постійних функцій $f_n(t)$ така, що

$$|f_1(t)| \leq |f_2(t)| \leq \dots \leq |f_n(t)| \leq \dots \text{ та } \int_0^T f_n(t) dt \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_0^T f(t) dt,$$

при цьому $|f_n(t)| \leq |f(t)|$ майже всюди. В такому разі $\int_0^T |f_n(t)| dt \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \int_0^T |f(t)| dt$.

Доведемо існування інтегралу вигляду (3).

Зафіксуємо будь-яке $x_0 \in X$ і розглянемо послідовність $\int_0^T f_n(t) dw(t, x_0)$, де f_n — послідовність кусково-постійних функцій, що збігаються в середньому до $f(x)$.

тобто $\int_0^T |f_n(t) - f(t)| dt \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$. Розглянемо різницю

$$\left| \int_0^T f_n(t) dw(t, x_0) - \int_0^T f_m(t) dw(t, x_0) \right| \leq \int_0^T |f_n(t) - f_m(t)| dw(t, x_0)$$

Оскільки $f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} f(t)$ в середньому, то $|f_n(t) - f_m(t)| \xrightarrow{n, m \rightarrow \infty} 0$ в середньому, і за лемою 4 $\text{Plim}_{m, n \rightarrow \infty} \int_0^T |f_n(t) - f_m(t)| dw(t) = \text{Nlilim}_{m, n \rightarrow \infty} \int_0^T |f_n(t) - f_m(t)| dw(t) = 0$.

Звідси $\lim_{m, n \rightarrow \infty} \int_0^T |f_n(t) - f_m(t)| dw(t, x_0) = 0$. Таким чином, послідовність $\int_0^T f_n(t) dw(t, x_0)$

фундаментальна, а тому збіжна. Ми довели, що існує $\text{Nlilim}_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t) dw(t, x) = Q(x)$.

Доведемо, що існує і границя за можливістю.

За лемою 3 для будь-якого $x_0 \in X$, для якого $P(\{x_0\}) \geq \alpha$, та $m > n$ з вибору послідовності $f_n(x)$

$$\left| \int_0^T f_n(t) - f_m(t) dw(t, x_0) \right| \leq \int_0^T |f_n(t) - f_m(t)| dt \cdot \sqrt{\Phi^{-1}(\alpha)} \leq \int_0^T |f - f_n(t)| dt \cdot \sqrt{\Phi^{-1}(\alpha)},$$

тобто послідовність $\int_0^T f_n(t) dw(t, x)$ фундаментальна рівномірно за x . За лемою 5 ця

послідовність збіжна рівномірно за x . За лемою 2 існує $\text{Plim}_{n \rightarrow \infty} \int_0^T f_n(t) dw(t)$.

Ми довели, що усі інтегровні за Лебегом функції інтегруються і за процесом нечіткого блукання. Але розподіл цього інтегралу поки невідомий. Обчислимо його.

За лемою 3

$$\left[\int_0^T f_n(t) dw(t) \right]_\alpha = \left[- \int_0^T |f_n(t)| dt \cdot \sqrt{\Phi^{-1}(\alpha)}, \int_0^T |f_n(t)| dt \cdot \sqrt{\Phi^{-1}(\alpha)} \right] = \bar{I}_n.$$

Цей проміжок із збільшенням n збільшується, границя його дорівнює

$I = \bigcup_n I_n = \left(- \int_0^T |f(t)| dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)}, \int_0^T |f(t)| dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} \right)$. Через $\bar{I}$ позначимо замикання I .

Очевидно, що α -зріз не може вийти за межі інтервалу $\bar{I}$. Треба показати, що він в точності дорівнює $\bar{I}$.

Для скорочення позначимо $M(f, \alpha) = \int_0^T |f(t)| dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)}$. Візьмемо будь-яке $\varepsilon > 0$. Для нього існує таке n_1 , що для $n > n_1$ $|M(f, \alpha) - M(f_n, \alpha)| < \varepsilon$. Оскільки

$\left[\int_0^T f_n(t) dw(t) \right]_\alpha = [-M(f_n, \alpha); M(f_n, \alpha)]$, то для кожного $n > n_1$ існує таке $x_n \in X$, що

$P(\{x\}) \geq \alpha$ та $\left| \int_0^T f_n(t) dw(x, t) - M(f_n, \alpha) \right| < \varepsilon$. За лемою 2 (зворотна частина) існує таке

$n_2 \geq n_1$, що для кожного $n > n_2$ $\left| \int_0^T f_n(t) dw(x, t) - \int_0^T f(t) dw(x, t) \right| < \varepsilon$ в незалежності від x .

Таким чином, для будь-якого ε $(-M(f_n, \alpha) + 3\varepsilon, M(f_n, \alpha) - 3\varepsilon) \subseteq \left[\int_0^T f(t) dw(t) \right]_\alpha$. Звідси

$I \subseteq \left[\int_0^T f(t) dw(t) \right]_\alpha$. Оскільки $\pm M(f, \alpha) \in \left[\int_0^T f(t) dw(t) \right]_{\alpha-\delta}$ для будь-якого $\delta > 0$, то

$P\left\{ \int_0^T f(t) dw(x, t) = \pm M(f, \alpha) \right\} \geq \alpha - \delta$. Звідси $P\left\{ \int_0^T f(t) dw(x, t) = \pm M(f, \alpha) \right\} = \alpha$, і кінці

відрізка $\bar{I}$ також входять в зріз.

Означення 9 [3]. Умовною можливістю події A відносно події B назвемо будь-який розв'язок $P(A|B)$ рівняння $\min\{P(A|B), P(B)\} = P(A \cap B)$.

Теорема 2. Для нечіткого процесу $\xi(t, x)$, який має інтегровні за Лебегом траєкторії та не залежить від процесу $w(t, x)$, виконується

$$\left[\int_0^T \xi(t, x) dw(t, x) \right]_\alpha = \left[- \sup_{x: P\{x\} \geq \alpha} \int_0^T |\xi(t, x)| dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)}, \sup_{x: P\{x\} \geq \alpha} \int_0^T |\xi(t, x)| dt \cdot \sqrt{\varphi^{-1}(\alpha)} \right].$$

Доведення. З незалежності процесів $P\{w(t, x) \in A | \xi(t, x) \in B\} = P\{w(t, x) \in A\}$. Таким чином, процес $\{w(t, x) | \xi(t, x) \in B\}$ є процесом нечіткого блукання, ідентичним $w(t, x)$. Залишається, по черзі фіксуючи $\xi \in X_\varepsilon$, скористатися лемою 6.

Тим самим ми розширили клас функцій, для яких існує інтеграл за процесом нечіткого блукання, у порівнянні з [1].

Тепер обчислимо інтеграл від процесу нечіткого блукання $\int_0^T w(t) dw(t)$.

Зафіксуємо будь-яке x таке, що $P(\{x\}) = \alpha > 0$. Кусково-постійні функції $f_n(t, x)$ визначимо так: $f_n(t, x) = \{w(t_i, x); t_i < t \leq t_{i+1}\}$; $t_i = \frac{iT}{n}$. Оскільки $w(t, x)$ задовольняє умову Ліпшица по t , то

$$|w(t, x) - f_n(t, x)| = |w(t, x) - w(t_i, x)| \leq L|t - t_i|,$$

де i підібране таким чином, що $t_i < t \leq t_{i+1}$. Звідси $f_n(t) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} w(t)$ для будь-яких t та

х. З поточної збіжності випливає збіжність в середньому.

Випишемо інтегральну суму

$$\begin{aligned} S_n &= \sum_{i=0}^{N-1} w(t_i)(w(t_{i+1}) - w(t_i)) = \sum_{i=0}^{N-1} w_i \Delta w_i = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} [(w_i + \Delta w_i)^2 - w_i^2 - (\Delta w_i)^2] = \frac{1}{2} [(w(T))^2 - (w(0))^2] - \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{n-1} (\Delta w_i)^2 \end{aligned}$$

Оцінимо останній член.

$$(\Delta w_i)^2 \leq \varphi^{-1}(\alpha)(t_{i+1} - t_i)^2 = \varphi^{-1}(\alpha) \frac{T^2}{n^2}, \quad \sum_{i=0}^{n-1} (\Delta w_i)^2 \leq n \varphi^{-1}(\alpha) \frac{T^2}{n^2} = \varphi^{-1}(\alpha) \frac{T^2}{n} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Таким чином, $\int_0^T w(t)dw(t) = \frac{1}{2} [(w(T))^2 - (w(0))^2].$

Література

0. О.Бичков Побудова інтегралу за процесом нечіткого блукання.// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки, №4, 2005.
0. Пытьев Ю. П.. Возможность. Элементы теории и применение. М.: УРСС. 2000. – 190с.
0. Чуличков А. И. . Математические модели нелинейной динамики. – М.: Физматлит, 2000. – 296 с.
0. Дюбуа Д., Прад А. Теория возможностей. Приложения к представлению знаний в информатике: Пер с фр. – М.: Радио и связь, 1990. – 288 с.

Надійшла до редакції 15.12.2005

УДК 510.6, 681.3.06

Людмила Л. Омельчук*

Система автоматизації доведення теорем теорії метаномінативних даних

На основі аксіоматичної системи специфікацій програм над метаномінативними даними побудовано прототип системи автоматизації доведення теорем теорії МНД.

Продemonстровано, що система дозволяє доводити властивості програм.

Ключові слова: Обчислюваність, обчислювані функції, ординал, семантика програм, частково обчислювані функції.

Ludmila L. Omelchuk*

System of automation the proof of the theorems of the theory metanominative data

The prototype of automatic theorem prover is constructed for the axiomatic system of program specification over metanominative data.

Is shown that the system permits to prove properties of the programs.

Key Words: Computability, computable functions, ordinal, semantics of the programs, partially computable functions.

*E-mail: ttp@unicyb.kiev.ua

Передмова

З метою побудови більш адекватних формалізмів специфікацій недетермінованих програм в [1] запропонована аксіоматична система специфікацій програм над метаномінативними даними (МНД). Така система є достатньо багатою та дозволяє доводити низку важливих властивостей часткових багатозначних функцій.

На основі аксіоматичної системи специфікацій програм над МНД [1] та секвенційного числення над МНД [2] в роботі побудовано прототип системи автоматизації доведення теорем теорії МНД (САДМД).

Цю систему сконструйовано на основі Системи Автоматизації Дедукції (САД), яка розробляється в межах досліджень з Алгоритму Очевидності (АО) [3]. Автор вдячний Олександру Лялецькому та Андрію Паскевичу за консультації з системи САД.

Система САДМД передбачає ввід в мові числення секвенцій для композиційно-номінативних логік часткових предикатів та здійснює пошук виводу, тобто встановлює вивідність секвенції першого порядку.

1. Аналіз задачі

Система САДМД містить наступні програми (відповідно до структури системи САД):

Програма *alice* – ядро системи, що обробляє вхідний текст. Використовує вбудований *reasoner* (збір доведення та евристика пошуку) та

підготовка до виводу. **Alice** написано в функціональній мові програмування Haskell (<http://haskell.org>).

Програма **moses** – прuver для логіки першого порядку з рівністю, що використовується в САДМД. **Moses** базується на розробленому секвенційному численні для композиційно-номінативних логік часткових предикатів [2] та написано на С.

Програма **haigha** – посередник між **alice** та зовнішніми прuverами. Написано на С.

Ці програми не призначені для безпосереднього використання. Інтерфейс для їх використання з метою встановлення вивідності зазначених секвенцій першого порядку забезпечується сценарієм **sad-moses**.

Система САДМД передбачає введення в мові числення секвенцій для композиційно-номінативних логік часткових предикатів та здійснює пошук виводу, тобто встановлює вивідність секвенції першого порядку.

Математична обробка тексту першого порядку системою САДМД полягає у виконанні наступних трьох етапів.

1. САДМД переводить вхідний текст, написаний на мові першого порядку в його внутрішнє представлення.
2. В переведеному тексті, система обирає множину цілей (твердження, що доводяться) та, для кожної цілі, визначає набір її логічних попередників (твердження, які потрібно використовувати в доведенні).
3. Система пробує виводити кожну ціль від її попередників. Для цього, САДМД використовує прuver логік першого порядку.

В програмі **alice** є такі головні модулі:

Модуль **FOL** – розбирає тексти першого порядку. Перетворює вхідний текст до відповідного внутрішнього представлення тексту.

Модуль **Reason** – керує верифікацією. Він формулює задачі верифікації, та намагається розв'язати їх, використовуючи його власні міркування разом з прuverом САДМД. Зокрема, **Reason** розбиває складну ціль на множину більш простих.

Модуль **Moses** – прuver САДМД. Він призначений для пошуку виводу. Виведення здійснено на основі числення секвенцій для композиційно-номінативних логік часткових предикатів, запропонованого в [2]. Прuver переглядає область пошуку, використовуючи обмежений пошук в глибину. Для підвищення ефективності пошуку виводу **Moses** використовує спеціальні обмеження и техніку згортання [4].

2. Формули вхідної мови САДМД

В [2] побудовано числення секвенцій для композиційно-номінативних логік часткових предикатів кванторного рівня, а також доведено його повноту та коректність за відношенням часткової істинності. Відповідно

до цього в САДМД будуються формули першого порядку, тексти першого порядку та встановлюється вивідність секвенції першого порядку.

Формули в САДМД будуються з лексем: змінних, функціональних та предикатних символів, за допомогою пропозиційних зв'язок, кванторів та дужок. Також дозволяється використовувати крапку Чорча для групування підформул. Використовуються наступні позначення (в дужках наводиться альтернативний варіант):

@ (forall)	квантор загальності	\$ (exists)	квантор існування
~ (iff)	еквівалентність	> (implies)	імплікація
(or)	диз'юнкція	& (and)	кон'юнкція
- (not)	заперечення	.	крапка Чорча
=	рівність	!=	нерівність
true	істина	false	фальш
^ (Ren)	реномінація	{ (M_in)	метаномінативна приналежність
%	включення МНД	"	рівність МНД
}	строге включення	' (Divs)	різниця МНД
; (Uni)	об'єднання МНД	* (Cros)	перетин МНД
/ (Set)	set	\ (Setr)	setr
' (Ord)	Ord	< (M_in_k)	належність до компонент

Кожна лексема є послідовністю латинських літер, цифр та підкреслювань з урахуванням регістру. Змінні, не пов'язані квантором явно, трактуються як константи.

3. Тексти вхідної мови САДМД

Тексти в мові першого порядку, що обробляються системою САДМД, являють собою послідовності формул, що завершуються крапкою.

Формули, перед якими стоїть двокрапка, розглядаються як цілі, які верифікатор намагається вивести з попередніх формул. Якщо верифікація завершилась успішно, ціль стає посилкою для наступних цілей. Інакше, система завершує роботу. Якщо текст завершується двокрапкою, то як заключна ціль приймається константа 'фальш'. Такий запис застосовується для пошуку заперечення множини формул. Одноцільові секвенції першого порядку, зокрема, є коректними текстами. Так, секвенція $P1, P2, P3 \rightarrow G$ представляється текстом $P1. P2. P3. : G.$

Дозволяються коментарі, які складаються з одного рядка, що починається символом '#'.
#

4. Приклади застосування системи САДМД

Аксіоми теорії МНД, що запропоновані в [5], описані окремим файлом в наступному вигляді:


```
# Extens (екстенсiональнiсть)
forall x,y (([(x,y)] { a } ~ ([x,y]) { b }) > (a " b).
# Fundov (фундованiсть)
(forall a ( forall x,y . [(x,y)] { a > P(a) & P(y) > P(a) )) > forall a . P(a).
# Induction for included
(forall a . (forall b . ((b } a) > P1(b)) > P1(a)) > (forall c . P1(c)).
# D-videl
forall a . exists b . forall x, y (([(x,y)] { b } ~ ([x,y]) { a } & P2(a)).
# Named (iменування)
exists c . [(x,y)] { c.
# Union (об'єднання)
exists c . ((a % c) & (b % c)).
# Netriv (нетривiальнiсть)
exists a,x,y . [(x,y)] { a.
# Prael (праелементи)
-([(x,y)] { u).
# Fundov 2
exists a . (P3(a) > (exists a1 . (P3(a1) & forall u,v . [(u,v)] { a1 >
((-P3(u)) & (-P3(v)))))).
```

Наведемо приклад специфiкацiї для адресної книги, яка мiстить записи (name, address), тут name є унiкальним.

Систему задамо наступним чином:

#addAddress (додавання нового запису)

```
forall addr_book, name, address . exists add_addr_book .
((- $ addr . [(name, addr)] { addr_book) >
(add_addr_book " (addr_book ; [(name, address)])) |
(($ addr . [(name, addr)] { addr_book) > (add_addr_book " addr_book))).
```

#findAddress (знаходження адреси особи)

```
forall addr_book, name . exists address .
(($ addr . [(name, addr)] { addr_book) > (address " addr)) |
((- $ addr . [(name, addr)] { addr_book) > (address " ill_defined))).
```

#cutAddress (видалення запису)

```
forall addr_book, name . exists cut_addr_book .
(($ addr . [(name, addr)] { addr_book) >
(cut_addr_book " (addr_book ` [(name, address)])) |
((- $ addr . [(name, addr)] { addr_book) > cut_addr_book " addr_book))).
```

Властивiсть: адресна книга порожня, або складається лише з пар (name, address).


```
linux:/home/luda/haskell/sad-041102 # ./sad-moses groups.ssg
[FOL] parsing successful
[Reason] inference search started
[Reason] line 35: goal: forall addr_book . ((~? na1 (na1 : addr_book)) | (@ na . ((
na : addr_book) > (? name1, address . (( [(name1, address)] " na)))))).
[Moses] launch (time limit: 180 sec, initial db: 1, final db: 0)
[Moses] proof tree (2 nodes, 2 levels):
[Moses]      -na()
[Moses]      na()
[Moses] proved in 0 ms -- proof tree nodes: 2 -- proof tree depth: 2
[Moses] inference steps: 2 -- born nodes: 2 -- depth bound: 1
[Reason] inference search successful
[Main] session finished in 00:00.03
[Main] 00:00.01 in [FOL] -- 00:00.00 in [Reason] -- 00:00.00 in [Moses]
linux:/home/luda/haskell/sad-041102 #
```

Висновки

Базуючись на аксіоматичній системі специфікацій програм над МНД та запропонованому в [2] секвенційному численні сингулярних композиційно-номінативних логік, побудовано прототип системи автоматизації доведення теорем теорії МНД (САДМД).

Продемонстровано, що система САДМД дозволяє доводити властивості програм. Тим самим показано, що запропонований підхід може ефективно використовуватися для побудови аксіоматичної системи специфікацій програм над МНД, що достатньо адекватно відповідає проблемам програмування.

Список літератури

1. Никитченко Н.С., Омельчук Л.Л., Шкильняк С.С., Янченко О.И. Аксиоматические системы спецификаций программ над номинативными данными // Пробл. программирования. – 2000. – № 1-2. – С. 259–272.
2. Омельчук Л.Л. Секвенційне числення для композиційно-номінативних логік часткових предикатів. – Вісн. Київ. ун-ту. Сер.: фіз.-мат. Науки. – 2003. – Вип. 4. – С. 270–278.
3. Lyaletski, A., Verchinine, K., Degtyarev, A., Paskevich, A.: System for Automated Deduction (SAD): Linguistic and deductive peculiarities. In Klopotek, M.A., Wierzchon, S.T., Michalewicz, M., eds.: Intelligent Information Systems 2002, (Proc. IIS'2002 Symposium, Sopot, Poland, June 3–6, 2002). Advances in Soft Computing, Physica-Verlag (2002) 413–422.
4. Letz, R., Stenz, G.: Model elimination and connection tableau procedures. In Robinson, A., Voronkov, A., eds.: Handbook for Automated Reasoning. Volume II. Elsevier Science (2001) 2017–2116
5. Омельчук Л.Л. Аксіоматичні системи для мов специфікацій програм Theoretical and applied aspects of program systems development (TAAPSD'2004). – Abstracts. – Kyiv, Ukraine, 2004. P. 57–61.

Надійшла до редакції 25.02.2006

УДК 519.718;681.516

Євгеній Ф. Сопронюк¹

Параметрична оптимізація в системах зі змінною вимірністю фазового простору

Для лінійних нестационарних систем зі змінною вимірністю фазового простору сформульована і розв'язана задача про оптимальний вибір параметрів функціонування такого роду систем. Доведена теорема про диференціювання критерію якості по параметрах, на основі якої розроблено алгоритм числового методу пошуку екстремального значення критерію якості.

Ключові слова: фазовий простір, зміна вимірності, вектор параметрів оптимізації, критерій якості, функція Гамільтона, спряжені змінні, числовий алгоритм.

¹ E-mail: jsopr@sacura.cv.ua

Yevgeny F. Sopronuik¹

The parametric optimization in the systems with the variable measurability of the phase space

For the linear transitional systems with the variable measurability of the phase space it was formulated and solved the task about the optimum choice of the parameters of such kind of system functioning. It was proved the theorem about the differentiation of the quality criteria to the parameters, on the base of which it was developed the algorithm of the digital method of the search of the quality criteria extreme meaning.

Key words: phase space, variable measurability, vector of the optimization parameters, quality criteria, Hamilton's function, conjugate variables, numerical algorithm.

Нехай на проміжку $[T_0, T_1]$ з розбиттям $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_N$ ($\tau_j = [t_{j-1}, t_j]$, $j = \overline{1, N-1}$, $\tau_N = [t_{N-1}, t_N]$, $t_0 = T_0$, $t_1 = T_1$) [1] рух об'єкта описується системою диференціальних рівнянь

$$\frac{dx^{(j)}(t)}{dt} = f^{(j)}(x^{(j)}(t), t, \alpha^{(j)}), \quad (1)$$

за умов зміни вимірності фазового простору

$$x^{(j)}(t_{j-1}) = g^{(j)}(x^{(j-1)}(t_{j-1}-), t_{j-1}, \alpha^{(j)}), \quad (2)$$

де $x^{(j)}(t)$ – вектор фазового стану об'єкта розмірності n_j , $t \in \tau_j$, $\alpha^{(j)}$ – вектор параметрів розмірності r_j , $f^{(j)}(x^{(j)}(t), t, \alpha^{(j)})$ – вектор-функції розмірності n_j , які неперервні за сукупністю аргументів разом зі своїми частинними похідними по t і по компонентах векторів $x^{(j)}$ та $\alpha^{(j)}$, $g^{(j)}(x^{(j-1)}(t_{j-1}-), t_{j-1}, \alpha^{(j)})$ – диференційовні вектор-функції розмірності n_j , які задають зміну вимірності фазового простору системи (1) в моменти t_{j-1} , $j = \overline{1, N}$, причому $g^{(1)}(x^{(0)}(t_0-), t_0, \alpha^{(1)}) = x^{(1)}(t_0)$, $x^{(1)}(t_0) = x_0^{(1)} \in G_0$.

$G_0 \subset R^n$ – замкнена обмежена множина. Надалі вважатимемо, що початковий момент t_0 і точки t_j , в яких система змінює вимірність фазового простору, залежать відповідно від векторних параметрів $\alpha^{(0)}$ і $\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(j)}$, тобто

$$t_0 = t_0(\alpha^{(0)}), t_j = t_j(\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(j)}), j = \overline{1, N-1}. \quad (3)$$

За критерій якості функціонування системи (1) за умов (2) виберемо функціонал

$$I(\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}) = \max_{x_0^{(1)} \in G_0} \Phi(x^{(N)}(t_N, \alpha^{(0)}, \dots, \alpha^{(N)}, x_0^{(1)})), \quad (4)$$

де $\Phi(x^{(N)}(t_N, \alpha^{(0)}, \dots, \alpha^{(N)}, x_0^{(1)}))$ – додатно-визначений функціонал від кінцевого стану системи (1).

Задача. Мінімізувати критерій якості (4) по параметрах $\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}$ на розв'язках системи (1) за умов (2), (3).

Позначимо вектор параметрів $\beta^{(v)} = (\alpha^{(0)T}, \alpha^{(1)T}, \dots, \alpha^{(v)T})^T$, $v = \overline{0, N}$. Нехай $\bar{\beta}^{(N)} = (\bar{\alpha}^{(0)T}, \bar{\alpha}^{(1)T}, \dots, \bar{\alpha}^{(N)T})^T$ – деякий фіксований набір параметрів, $q = (q_1^{(0)}, \dots, q_{r_0}^{(0)}, q_1^{(1)}, \dots, q_{r_1}^{(1)}, \dots, q_1^{(N)}, \dots, q_{r_N}^{(N)})^T$ – одиничний вектор деякого напрямку в області параметрів. Для розв'язання поставленої задачі запропонуємо числовий алгоритм [2, 3]. Знайдемо похідну функції (4) при $\beta^{(N)} = \bar{\beta}^{(N)}$ у напрямку вектора q , $\|q\| = 1$,

$$\frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} = \max_{x_0^{(1)} \in G_0} \left(\sum_{v=0}^N \sum_{k_v=1}^{r_v} \text{grad}_{x^{(N)}}^T \Phi(x^{(N)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}, x_0^{(1)})) \frac{\partial x^{(N)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(v)}} q_{k_v}^{(v)} \right) \quad (5)$$

на множині

$$\bar{G}_0 = \left\{ z \in G_0 : \Phi(x^{(N)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}, z)) = \max_{x_0^{(1)} \in G_0} \Phi(x^{(N)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}, x_0^{(1)})) \right\}. \quad (6)$$

Щоб обчислити праву частину (5), скористаємось методикою, запропонованою в [2, 3]. Введемо вектор-функції

$$y_{k_p}^{(v,p)}(t, \bar{\beta}^{(v)}) = \frac{\partial x^{(v)}(t, \bar{\beta}^{(v)})}{\partial \alpha_{k_p}^{(p)}}, \quad (7)$$

де $\alpha_{k_p}^{(p)}$ – компонента з індексом k_p , $k_p = \overline{1, r_p}$, вектора параметрів $\alpha^{(p)}$, $p = 0, \dots, v$, $v = \overline{0, N}$.

Ці функції при $t \in \tau_v$, $k_p = \overline{1, r_p}$, $p = 0, \dots, v-1$, $v = \overline{1, N}$ задовольняють лінійні системи диференціальних рівнянь [4]

$$\frac{dy_{k_p}^{(\nu,p)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)})}{dt} = \frac{\partial f^{(\nu)}(x^{(\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)}), t, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial x^{(\nu)}} y_{k_p}^{(\nu,p)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)}), \quad (8)$$

за умов

$$\begin{aligned} y_{k_p}^{(\nu,p)}(t_{\nu-1}, \bar{\beta}^{(\nu)}) = & \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial x^{(\nu-1)}} y_{k_p}^{(\nu-1,p)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}) + \\ & + \left(\frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial x^{(\nu-1)}} f^{(\nu-1)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu-1)}) - \right. \\ & \left. - f^{(\nu)}(x^{(\nu)}(t_{\nu-1}, \bar{\beta}^{(\nu)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)}) + \right. \\ & \left. + \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial t_{\nu-1}} \right) \frac{\partial t_{\nu-1}}{\partial \alpha_{k_p}^{(p)}}, \end{aligned} \quad (9)$$

причому

$$y_{k_0}^{(1,0)}(t_0, \bar{\beta}^{(1)}) = \frac{\partial x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} - f^{(1)}(x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)}), t_0, \bar{\alpha}^{(0)}) \frac{\partial t_0(\bar{\alpha}^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}}, \quad (10)$$

а $y_{k_v}^{(\nu,\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)})$ при $t \in \tau_v$, $k_v = \overline{1, r_v}$, $v = \overline{1, N}$, є розв'язками системи

$$\begin{aligned} \frac{dy_{k_v}^{(\nu,\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)})}{dt} = & \frac{\partial f^{(\nu)}(x^{(\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)}), t, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial x^{(\nu)}} y_{k_v}^{(\nu,\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)}) + \\ & + \frac{\partial f^{(\nu)}(x^{(\nu)}(t, \bar{\beta}^{(\nu)}), t, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(\nu)}}, \end{aligned} \quad (11)$$

за умов

$$y_{k_v}^{(\nu,\nu)}(t_{\nu-1}) = \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}^-, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(\nu)}}, \quad k_v = \overline{1, r_v}, \quad v = \overline{2, N}, \quad (12)$$

причому

$$y_{k_1}^{(1,1)}(t_0) = 0, \quad k_1 = \overline{1, r_1}. \quad (13)$$

Системи диференціальних рівнянь (8) та (11) одержуються диференціюванням лівої і правої частин (1) по компоненті $\alpha_{k_p}^{(p)}$, $k_p = \overline{1, r_p}$, вектора параметрів $\alpha^{(p)}$, $p = 0, \dots, \nu$, $\nu = \overline{0, N}$.

Для того, щоб показати виконання умови (10), подамо розв'язок (1) при $t \in \tau_1$ у вигляді

$$x^{(1)}(t, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}) = x_0^{(1)}(t_0, \alpha^{(0)}) + \int_{t_0(\alpha^{(0)})}^t f^{(1)}(x^{(1)}(\tau, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}), \tau, \alpha^{(1)}) d\tau. \quad (14)$$

Знайдемо похідну обох частин (14) по компоненті $\alpha_{k_0}^{(0)}$ вектора параметрів $\alpha^{(0)}$, $1 \leq k_0 \leq r_0$,

$$\begin{aligned} y_{k_0}^{(1,0)}(t, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}) &= \frac{\partial x^{(1)}(t_0, \alpha^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} + \\ &+ \int_{t_0(\alpha^{(0)})}^t \frac{\partial f^{(1)}(x^{(1)}(\tau, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}), \tau, \alpha^{(1)})}{\partial x^{(1)}} y_{k_0}^{(1)}(\tau, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}) d\tau + \\ &- f^{(1)}(x^{(1)}(t_0, \alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}), t_0(\alpha^{(0)}), \alpha^{(1)}) \frac{\partial t_0(\alpha^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}}. \end{aligned}$$

Звідси при $t = t_0(\alpha^{(0)})$ одержуємо (10).

Співвідношення (9) та (12) – це умови для визначення значень векторів $y_{k_p}^{(\nu, p)}(t)$ в точках $t_1, t_2, \dots, t_{N-1}$, в яких система (1) змінює вимірність фазового простору. Умови (9), (12) і (13) легко одержати, враховуючи (2) та диференціюючи $x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}-) = x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}-, \beta^{(\nu-1)})$ і $x^{(\nu)}(t_{\nu-1}) = x^{(\nu)}(t_{\nu-1}, \beta^{(\nu)})$ по компоненті $\alpha_{k_p}^{(p)}$, $k_p = \overline{1, r_p}$, $p = 0, \dots, \nu$, векторів параметрів $\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(\nu)}$, $\nu = \overline{0, N}$.

Система (8) за умов (9), (10) і система (11) за умов (12), (13) повністю визначають шукані вектор-функції $y_{k_p}^{(\nu, p)}(t)$, $t \in \tau_\nu$, $k_p = \overline{1, r_p}$, $p = 0, \dots, \nu$, $\nu = \overline{0, N}$.

Запровадимо вектори спряжених змінних $\psi^{(j)}(t)$, $t \in \tau_j$, розмірності n_j , як розв'язки наступних задач

$$\frac{d\psi^{(j)}(t)}{dt} = - \left(\frac{\partial f^{(j)}(x^{(j)}(t, \bar{\alpha}^{(0)}, \dots, \bar{\alpha}^{(j)}), t, \bar{\alpha}^{(j)})}{\partial x^{(j)}} \right)^T \psi^{(j)}(t), \quad (15)$$

$$\psi^{(N)}(t_N) = - \text{grad}_{x^{(N)}} \Phi(x^{(N)}(t_N, \bar{\alpha}^{(0)}, \dots, \bar{\alpha}^{(N)}, x_0^{(1)})), \quad (16)$$

$$\psi^{(j-1)}(t_{j-1}-) = \left(\frac{\partial g^{(j)}(x^{(j-1)}(t_{j-1}-, \bar{\beta}^{(j-1)}), t_{j-1}, \bar{\alpha}^{(j)})}{\partial x^{(j-1)}} \right)^T \psi^{(j)}(t_{j-1}), \quad (17)$$

де $j = N, \dots, 2$.

Позначимо через $H_j(x^{(j)}, \psi^{(j)}, t, \alpha) = \psi^{(j)T}(t) f^{(j)}(x^{(j)}, t, \alpha^{(j)})$, $t \in \tau_j, j = \overline{1, N}$, функцію Гамільтона-Понтрягіна [2].

Використовуючи спряжені змінні, вираз (5) для похідної функціонала (4) в напрямку q в області параметрів $\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}$ при фіксованих значеннях параметрів $\alpha^{(0)} = \bar{\alpha}^{(0)}, \alpha^{(1)} = \bar{\alpha}^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)} = \bar{\alpha}^{(N)}$ запишемо у вигляді

$$\frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} = \max_{x_0^{(1)} \in G_0} \left(- \sum_{\nu=0}^N \sum_{k_\nu=1}^{r_\nu} \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_\nu}^{(N,\nu)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) q_{k_\nu}^{(\nu)} \right). \quad (18)$$

Теорема. Похідна функціонала $I(\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)})$ у напрямку q в області параметрів $\alpha^{(0)}, \alpha^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)}$ при фіксованих значеннях параметрів $\alpha^{(0)} = \bar{\alpha}^{(0)}, \alpha^{(1)} = \bar{\alpha}^{(1)}, \dots, \alpha^{(N)} = \bar{\alpha}^{(N)}$ на розв'язках системи (1) за умов (2) обчислюється за формулою

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} = \max_{x_0 \in G_0} & \left\{ - \left[\sum_{k_0=1}^{r_0} \left(\psi^{(1)T}(t_0) \left(\frac{\partial x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} - \right. \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. - f^{(1)}(x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)}), t_0, \bar{\alpha}^{(1)}) \frac{\partial t_0}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} \right) + \right. \right. \\ & + \sum_{j=1}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) \left(\frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial t_j} + \right. \right. \\ & + \frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial x^{(j)}} f^{(j)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j)}) - \\ & \left. \left. \left. - f^{(j+1)}(x^{(j+1)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)}) \right) \frac{\partial t_j}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} \right) \right] q_{k_0}^{(0)} + \\ & + \sum_{\nu=1}^N \left(\sum_{k_\nu=1}^{r_\nu} \left(\psi^{(\nu)T}(t_{\nu-1}) \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_\nu}^{(\nu)}} + \right. \right. \\ & + \int_{t_{\nu-1}}^{t_\nu} \frac{\partial H_\nu(x^{(\nu)}(\tau, \bar{\beta}^{(\nu)}), \psi^{(\nu)}(\tau), \tau, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_\nu}^{(\nu)}} d\tau + \\ & + \sum_{j=\nu}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) \left(\frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial t_j} + \right. \right. \\ & + \frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial x^{(j)}} f^{(j)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j)}) - \end{aligned}$$

$$\left. - f^{(j+1)}(x^{(j+1)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)}) \frac{\partial t_j}{\partial \alpha_{k_v}^{(v)}} \right) q_{k_v}^{(v)} \Bigg] \Bigg\}. \quad (19)$$

Доведення. Запишемо похідну $\frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q}$ у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} = \max_{x_0^{(1)} \in G_0} & \left(- \left(\sum_{k_0=1}^{r_0} \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_0}^{(N,0)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) q_{k_0}^{(0)} + \right. \right. \\ & + \sum_{k_1=1}^{r_1} \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_1}^{(N,1)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) q_{k_1}^{(1)} + \dots + \\ & \left. \left. + \sum_{k_N=1}^{r_N} \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_N}^{(N,N)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) q_{k_N}^{(N)} \right) \right). \end{aligned} \quad (20)$$

Розглядаючи похідну від скалярного добутку $\psi^{(j)T}(t) y_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)})$, $t \in \tau_j$, $k_v = \overline{1, r_v}$, $v = 1, \dots, j-1$, а також використовуючи (8), одержуємо

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} \left(\psi^{(j)T}(t) y_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)}) \right) = \\ & = \frac{d\psi^{(j)T}(t)}{dt} y_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)}) + \psi^{(j)T}(t) \frac{dy_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)})}{dt} = \\ & = -\psi^{(j)T}(t) \frac{\partial f^{(j)}(x^{(j)}(t, \bar{\beta}^{(j)}), t, \bar{\alpha}^{(j)})}{\partial x^{(j)}} y_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)}) + \\ & + \psi^{(j)T}(t) \frac{\partial f^{(j)}(x^{(j)}(t, \bar{\beta}^{(j)}), t, \bar{\alpha}^{(j)})}{\partial x^{(j)}} y_{k_v}^{(j,v)}(t, \bar{\beta}^{(j)}) = 0. \end{aligned} \quad (21)$$

Аналогічно, враховуючи (11), при $v = j$ маємо

$$\frac{d}{dt} \left(\psi^{(j)T}(t) y_{k_j}^{(j,j)}(t, \bar{\beta}^{(j)}) \right) = \frac{\partial H_j(x^{(j)}(t, \bar{\beta}^{(j)}), t, \alpha^{(j)})}{\partial \alpha_{k_j}^{(j)}}. \quad (22)$$

Тому, інтегруючи (21) та (22) в межах від t_{j-1} до t_j , одержимо співвідношення

$$\psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_v}^{(j,v)}(t_j - , \bar{\beta}^{(j)}) - \psi^{(j)T}(t_{j-1}) y_{k_v}^{(j,v)}(t_{j-1}, \bar{\beta}^{(j)}) = c_{k_v}^{(j,v)}, \quad (23)$$

де $c_{k_v}^{(j,v)}$ – довільні сталі, $k_v = \overline{1, r_v}$, $v = 0, 1, \dots, j-1$,

$$\psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_j}^{(j,j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}) - \psi^{(j)T}(t_{j-1}) y_{k_j}^{(j,j)}(t_{j-1}, \bar{\beta}^{(j)}) =$$

$$= \int_{t_{j-1}}^{t_j} \frac{\partial H_j(x^{(j)}, \psi^{(j)}, \tau, \bar{\alpha}^{(j)})}{\partial \alpha_{k_j}^{(j)}} d\tau. \quad (24)$$

Вважаючи, що довільні сталі в (23) $c_{k_v}^{(j,v)} = 0$, а також рівності (24), одержимо при $v = 0$

$$\begin{aligned} & \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_0}^{(N,0)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) = \\ & = \sum_{j=1}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) y_{k_0}^{(j+1,0)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}) - \psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_0}^{(j,0)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}) \right) + \\ & + \psi^{(1)T}(t_0) y_{k_0}^{(1,0)}(t_0, \bar{\beta}^{(1)}), \end{aligned} \quad (25)$$

а для $v = 1, \dots, N$

$$\begin{aligned} & \psi^{(N)T}(t_N) y_{k_v}^{(N,v)}(t_N, \bar{\beta}^{(N)}) = \\ & = \sum_{j=v}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) y_{k_v}^{(j+1,v)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}) - \psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_v}^{(j,v)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}) \right) + \\ & + \psi^{(v)T}(t_{v-1}) y_{k_v}^{(v,v)}(t_v, \bar{\beta}^{(v)}) + \int_{t_{v-1}}^{t_v} \frac{\partial H_v(x^{(v)}(\tau, \bar{\beta}^{(v)}), \tau, \bar{\alpha}^{(v)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(v)}} d\tau. \end{aligned} \quad (26)$$

Тепер можемо записати

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} &= \max_{x_0^{(1)} \in G_0} \left(- \sum_{v=1}^N \sum_{k_v=1}^{r_v} \left(\sum_{j=v}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) y_{k_v}^{(j+1,v)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}) - \right. \right. \right. \\ & \quad \left. \left. - \psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_v}^{(j,v)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}) \right) + \right. \\ & \quad \left. + \psi^{(v)T}(t_{v-1}) y_{k_v}^{(v,v)}(t_v, \bar{\beta}^{(v)}) + \int_{t_{v-1}}^{t_v} \frac{\partial H_v(x^{(v)}(\tau, \bar{\beta}^{(v)}), \tau, \bar{\alpha}^{(v)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(v)}} d\tau \right) q_{k_v}^{(v)} + \\ & + \sum_{k_0=1}^{r_0} \left(\sum_{j=0}^{N-1} \left(\psi^{(j+1)T}(t_j) y_{k_0}^{(j+1,0)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}) - \psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_0}^{(j,0)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}) \right) + \right. \\ & \quad \left. + \psi^{(1)T}(t_0) y_{k_0}^{(1,0)}(t_0, \bar{\beta}^{(1)}) \right) q_{k_0}^{(0)}. \end{aligned} \quad (27)$$

У співвідношенні (27) використаємо умови (9), (10), (12) і врахуємо (17), подаючи

$$\begin{aligned} & \psi^{(j+1)T}(t_j) y_{k_v}^{(j+1,v)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}) - \psi^{(j)T}(t_j -) y_{k_v}^{(j,v)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}) = \\ & = \psi^{(j+1)T}(t_j) \left(\frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j -, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial t_j} - \right. \\ & \quad \left. - f^{(j+1)}(x^{(j+1)}(t_j, \bar{\beta}^{(j+1)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)}) + \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{\partial g^{(j+1)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j+1)})}{\partial x^{(j)}} f^{(j)}(x^{(j)}(t_j, \bar{\beta}^{(j)}), t_j, \bar{\alpha}^{(j)}) \left) \frac{\partial t_j}{\partial \alpha_{k_j}^{(j)}}, \quad (28)$$

для всіх $j = 1, \dots, N-1$, $\nu = 0, 1, \dots, N$,

$$\psi^{(\nu)T}(t_{\nu-1}) y_{k_\nu}^{(\nu, \nu)}(t_\nu, \bar{\beta}^{(\nu)}) = \psi^{(\nu)T}(t_{\nu-1}) \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_\nu}^{(\nu)}}, \quad (29)$$

$\nu = 1, \dots, N$,

$$\psi^{(1)T}(t_0) y_{k_0}^{(1,0)} = \psi^{(1)T}(t_0) \left(\frac{\partial x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} - f^{(1)}(x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)}), t_0, \bar{\alpha}^{(1)}) \right) \frac{\partial t_0}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}}. \quad (30)$$

Підставляючи (28), (29), (30) у (27), одержимо (19). Теорема доведена.

Формулу (19) можна застосовувати для розв'язання багатьох прикладних задач. Нехай, наприклад, вектор параметрів $\beta^{(N)}$ є вектором точок, в яких система (1) змінює вимірність фазового простору. Тобто кожний з векторів параметрів $\alpha^{(1)}, \alpha^{(2)}, \dots, \alpha^{(N-1)}$ є скалярною величиною і дорівнює відповідно $t_1, t_2, \dots, t_{N-1}$. Тоді $\frac{\partial I(t_0, t_1, \dots, t_{N-1})}{\partial q}$ обчислюється за

формулою

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\bar{t}_0, \dots, \bar{t}_{N-1})}{\partial q} = \max_{x_0^{(1)} \in \bar{G}_0} \left\{ - \sum_{\nu=0}^{N-1} \left(\psi^{(\nu+1)T}(\bar{t}_\nu) \left(\frac{\partial g^{(\nu+1)}(x^{(\nu)}(\bar{t}_\nu, \bar{\beta}^{(\nu)}), \bar{t}_\nu, \bar{\alpha}^{(\nu+1)})}{\partial t_\nu} \right. \right. \right. \\ \left. \left. - f^{(\nu+1)}(x^{(\nu+1)}(\bar{t}_\nu, \bar{\beta}^{(\nu+1)}), \bar{t}_\nu, \bar{\alpha}^{(\nu+1)}) \right) + \right. \\ \left. + \frac{\partial g^{(\nu+1)}(x^{(\nu)}(\bar{t}_\nu, \bar{\beta}^{(\nu)}), \bar{t}_\nu, \bar{\alpha}^{(\nu+1)})}{\partial x^{(\nu)}} f^{(\nu)}(x^{(\nu)}(\bar{t}_\nu, \bar{\beta}^{(\nu)}), \bar{t}_\nu, \bar{\alpha}^{(\nu)}) \right) + \\ \left. + \int_{\bar{t}_\nu}^{\bar{t}_{\nu+1}} \frac{\partial H_{\nu+1}(x^{(\nu+1)}(\tau, \bar{\beta}^{(\nu+1)}), \psi^{(\nu+1)}(\tau), \bar{t}_\nu)}{\partial t_\nu} d\tau \right) q_\nu \}. \end{aligned}$$

Якщо $t_0, t_1, \dots, t_{N-1}$ не залежать від параметрів, то (19) набуває вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial I(\bar{\beta}^{(N)})}{\partial q} = \max_{x_0 \in \bar{G}_0} \left\{ - \left[\sum_{k_0=1}^{r_0} \psi^{(1)T}(t_0) \frac{\partial x^{(1)}(t_0, \bar{\alpha}^{(0)})}{\partial \alpha_{k_0}^{(0)}} q_{k_0}^{(0)} + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{\nu=1}^N \sum_{k_\nu=1}^{r_\nu} \left(\psi^{(\nu)T}(t_{\nu-1}) \frac{\partial g^{(\nu)}(x^{(\nu-1)}(t_{\nu-1}, \bar{\beta}^{(\nu-1)}), t_{\nu-1}, \bar{\alpha}^{(\nu)})}{\partial \alpha_{k_\nu}^{(\nu)}} + \right. \right. \right. \end{aligned}$$

$$+ \left. \int_{t_{v-1}}^{t_v} \frac{\partial H_v(x^{(v)}(\tau, \bar{\beta}^{(v)}), \psi^{(v)}(\tau), \tau, \bar{\alpha}^{(v)})}{\partial \alpha_{k_v}^{(v)}} d\tau \right] q_{k_v}^{(v)} \Bigg\}.$$

У випадку, коли $\alpha^{(0)} = x_0^{(1)}$ – n_1 -вимірний вектор параметрів, а інші параметри відсутні, то

$$\frac{\partial I(\bar{x}_0^{(1)})}{\partial q} = \max_{x_0 \in \bar{G}_0} \left\{ - \sum_{v=1}^{n_1} \psi_v^{(1)}(t_0) q_v \right\}.$$

Нехай $\alpha^{(0)} = t_0$ – скалярний параметр, а $x_0^{(1)}$ не залежить від $\alpha^{(0)}$. Тоді з (19) одержимо

$$\frac{\partial I(\bar{t}_0)}{\partial q} = \max_{x_0 \in \bar{G}_0} \left\{ \psi^{(1)T}(t_0) f^{(1)}(x^{(1)}(t_0), t_0) \right\}.$$

На основі формул для обчислення похідних у даному напрямку в області параметрів одержуємо наступний рекурсивний алгоритм [3] для відшукування мінімуму критерію (4):

$$\beta^{(N)(i+1)} = P\{\beta^{(N)(i)} - \gamma_i q\},$$

де γ_i – крок методу на $i+1$ -й ітерації, $P\{\cdot\}$ – оператор проектування на допустиму множину параметрів, q – напрям найшвидшого спуску, який шукаємо за формулою (19). Множину $\bar{G}_0$ знаходимо за співвідношенням (6). Далі, як і в [3], міркуємо так: якщо множина $\bar{G}_0$ містить єдину точку, то за напрямок найшвидшого спуску вибираємо напрямок, знайдений за (19). У разі, коли $\bar{G}_0$ містить більше однієї точки, то для всіх точок цієї множини знаходимо градієнт і будуємо лінійну оболонку на цих векторах. За напрямок спуску беремо точку лінійної оболонки, яка має мінімальну відстань від початку координат.

Обчислення за наведеним алгоритмом можна завершити, коли справджується нерівність

$$|I(\beta^{(N)(i+1)}) - I(\beta^{(N)(i)})| < \varepsilon,$$

де $\varepsilon > 0$ – довільне наперед задане число.

Література

1. Гаращенко Ф.Г., Сопронюк Є.Ф. Теорема про практичну стійкість систем зі зміною вимірності фазового простору // Вісник Київського університету. Фізико-математичні науки. – 2003. – № 4. – С. 171–177.
2. Бублик Б.Н., Гаращенко Ф.Г., Кириченко Н.Ф. Структурно-параметрическая оптимизация и устойчивость динамики пучков – К.: Наукова думка, 1985. – 305 с.

УДК 517.988

Володимир В.Хлобистов *

Олена Ф.Кашпур

Тетяна М.Малишева

**Про множину операторних
інтерполянтів, гранично інваріант-
них щодо поліномів**

В гільбертовому просторі розглянуто інтерполянти, що відповідають інтерполяційним умовам типу Лагранжа, Ерміта та Абеля-Гончарова. Для поліноміальних операторів показано, що вони співпадають та асимптотично збігаються багаточлени відповідного степеня, для не поліноміальних операторів вони різні.

Ключові слова: нелінійний оператор, гільбертовий простір, інтерполяційні умови типу Лагранжа, Ерміта, Абеля-Гончарова, інтерполянт, диференціал Гато.

khl@i.com.ua

moe@unicyb.kiev.ua

UDK 517.988

Volodimir V. Khlobystov *

Olena F. Kashpur

Tetyana M. Malysheva

**On set of operator interpolants,
asymptotically invariants on
polynomials**

In Hilbert space interpolants which satisfy interpolation condition Lagrange, Hermit and Abel-Goncharov type are considered. For polynomial operators are showed, that they are coincides and asymptotically retains operator polynomials of the same degree, for nonpolynomial operators they are different.

Key words: nonlinear operator, Hilbert space, interpolate conditions type of Lagrange, Hermite, Abel-Goncharov, interpolant, Gateaux differential.

Інтерполювання є одним із важливих методів розв'язання задачі про наближення операторів. В [1, 2] побудовано основи теорії поліноміальної операторної інтерполяції. Відомо, що розв'язок інтерполяційної задачі в нескінченновимірному гільбертовому просторі не єдиний, а при знаходженні інтерполянтів, що є інваріантними відносно поліномів відповідного степеня, виникають труднощі. Відмітимо, що властивість збереження інтерполяційними поліномами багаточленів того ж степеня є важливою для багатьох прикладних задач, а саме: одержання оцінок точності інтерполювання та теорем про збіжність інтерполяційних процесів при зростанні числа вузлів; оцінок, які використовують нерівність Лебега; побудова квадратурних формул при інтегруванні за мірою та ін. В [3, 4] наведено інтерполяційні операторні формули Ньютона, що є точними на поліномах того ж степеня, але реалізація інтерполяційних формул вимагає існування варіацій чи похідних вищих порядків та відповідних кратних інтегралів Рімана-Стієльса по оператору скалярного аргументу, що ускладнює застосування цих формул на практиці.

Стаття є продовженням робіт [5–7], що присвячені побудові інтерполяційних поліномів та дослідженню їх властивості асимптотичного (в сенсі зростання кількості вузлів) збереження багаточленів відповідного степеня для поліноміального оператора. В цьому випадку для забезпечення заданої точності інтерполювання можна визначити необхідне число вузлів і не має потреби вимагати нескінченного його зростання. Зауважимо, що на практиці поширені нелінійні системи поліноміального виду [8]. В статті розглянуто інтерполянти, що відповідають інтерполяційним умовам типу Лагранжа [1, 9], типу Ерміта [7], коли у нулі задані значення оператора та його диференціалів Гато до певного порядку включно за напрямками, що є першими елементами ортонормованого базису та побудовано інтерполяційний поліном, що задовольняє інтерполяційні умови типу Абеля-Гончарова, тобто: в k -му вузлі задана k -та похідна оператора [10]. Для поліноміальних операторів показано, що всі розглянуті інтерполянти є асимптотично точними на багаточленах відповідного степеня та співпадають між собою, а у випадку не поліноміальних операторів вони різні. При цьому для їх побудови необхідно знати лише інформацію про вузлові значення оператора чи значення його диференціалів Гато до певного порядку включно у вузлах.

Нехай X, Y – гільбертові простори (X – сепарабельний), Π_n – множина операторних поліномів $P_n: X \rightarrow Y$ степеня n :

$$\Pi_n = \{P_n(x): P_n(x) = L_0 + L_1x + L_2x^2 + \dots + L_nx^n\}, \quad (1)$$

де $L_0 \in Y$, $L_kx^k: X \rightarrow Y$ – k -а операторна степінь, що отримана із k -лінійної неперервної симетричної операторної форми $L_k(v_1, v_2, \dots, v_k): X^k \rightarrow Y$ коли $v_1 = v_2 = \dots = v_k = x$, $k = \overline{1, n}$. Нехай $\{x_i\}_{i=1}^m$ – система елементів із X , оператор $F: X \rightarrow Y$, в загальному випадку нелінійний, заданий своїми значеннями $F(x_i) \in Y$, $i = \overline{0, m}$. Постановка інтерполяційної задачі типу Лагранжа полягає у наступному: потрібно знайти такий поліном $P_{m,n}: X \rightarrow Y$, $P_{m,n} \in \Pi_n$ що відповідає умовам

$$P_{m,n}(x_i) = F(x_i), \quad i = \overline{0, m}. \quad (2)$$

В [1, 2] побудовано всю множину інтерполяційних поліномів

$$P_{m,n}(x) = Q_n(x) + \left\langle \bar{F} - \bar{Q}_n, \Gamma^+ \sum_{i=1}^n \{(x, x_i)\}_{i=1}^m \right\rangle, \quad Q_n \in \Pi_n, \quad (3)$$

де $(\cdot, \cdot)$ – скалярний добуток в X , $\bar{F} = \{F(x_i)\}_{i=1}^m$, $\bar{Q}_n = \{Q_n(x_i)\}_{i=1}^m$, Γ^+ – псевдо-обернена матриця Мура-Пенроуза до матриці $\Gamma = \left\| \sum_{k=0}^n (x_i, x_j)^k \right\|_{i,j=1}^m$, $0^0 = 1$ та

показано, що умова

$$Z\bar{F} = \bar{0} \quad (4)$$

є необхідною та достатньою для розв'язання інтерполяційної задачі (1), (2). Тут Z – матриця, рядками якої є координати ортонормованих власних векторів матриці Γ з нульовим власним числом. Надалі, нехай $e_1, e_2, \dots, e_m$ – перші m елементів ортонормованого базису простору X . Визначимо множину $\mathfrak{Z}(m)$, що побудована за системою елементів $e_i, i = \overline{1, m}$, наступним чином:

$$\mathfrak{Z}(m) = \{0, e_{i_1} + e_{i_2} + \dots + e_{i_k}, k = \overline{1, n}, i_j = \overline{1, m}, m \geq n\}.$$

Число її елементів дорівнює $1 + N$, $N = \sum_{k=1}^n C_{m+k-1}^k$.

В [9] для нелінійного оператора $F: X \rightarrow Y$, що заданий своїми значеннями $F(x_i) \in Y, i = \overline{0, N}$ на множині $\mathfrak{Z}(m)$, за допомогою метода ортогональних моментів [11] побудовано інтерполяційний поліном типу Лагранжа наступного вигляду

$$P_{m,n}(x; F) = \sum_{k=0}^n \sum_{j_1, \dots, j_k=1}^m a_{j_1 j_2 \dots j_k}(F)(x, e_{j_1})(x, e_{j_2}) \dots (x, e_{j_k}), \quad (5)$$

де $a_{j_1 j_2 \dots j_k}(F), k = \overline{1, n}$ – невідомі, симетричні відносно своїх індексів коефіцієнти, що визначаються однозначно на підставі інтерполяційних умов (2) за рекурентною процедурою [9]:

$$\begin{aligned} a_{j_1 j_2 \dots j_n}(F) = & \frac{1}{n!} \{ F(e_{j_1} + e_{j_2} + \dots + e_{j_n}) + \\ & + [F(e_{j_1} + e_{j_2} + \dots + e_{j_{n-1}}) + \dots + F(e_{j_2} + e_{j_3} + \dots + e_{j_n})] - \\ & - [F(e_{j_1} + e_{j_2} + \dots + e_{j_{n-2}}) + \dots + F(e_{j_3} + e_{j_4} + \dots + e_{j_n})] + \dots + \\ & + (-1)^{n-1} [F(e_{j_1}) + F(e_{j_2}) + \dots + F(e_{j_n})] + (-1)^n F(0) \}. \end{aligned} \quad (6)$$

Коефіцієнти $a_{j_1 j_2 \dots j_{n-1}}(F)$ знаходяться за формулою (6) із заміною n на $n-1$ та заміною значень оператора $F(x)$ на множині вузлів $\mathfrak{Z}(m)$ на значення

$$F(x) - \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{n-1}=1}^m a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}}(F)(x, e_{i_1})(x, e_{i_2}) \dots (x, e_{i_{n-1}}) \text{ на тій же множині і т.д.}$$

Рекурентна процедура, за допомогою якої однозначно знаходяться коефіцієнти $a_{j_1 j_2 \dots j_k}(F), k = \overline{1, n}$, еквівалентна розв'язанню системи лінійних рівнянь (2) відносно невідомих $a_{j_1 j_2 \dots j_k}(F), k = \overline{1, n}$. Зауважимо, що інтерполянт (5), (6) розв'язує задачу (2) при будь-яких значеннях $F(x_i) \in Y, x_i \in \mathfrak{Z}(m)$, тобто дана задача інтерполювання інваріантно розв'язувана. Звідси випливає виконання умови (4) $\forall F(x_i) \in Y, x_i \in \mathfrak{Z}(m)$.

Покладемо в (3) $Q_n(x) = 0$ і розглянемо розв'язання інтерполяційної задачі (2) на послідовності вузлів $\mathfrak{Z}(m)$ за допомогою інтерполянта (3). Якщо в (3) розкриємо $\langle \cdot, \cdot \rangle$, то дістанемо формулу еквівалентну (5), де замість

$a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$, $k = \overline{1, n}$ будуть деякі інші коефіцієнти $b_{i_1 i_2 \dots i_k} \in Y$. Отже, розв'язками задачі (2) є два інтерполянта однакової структури. При цьому для конструктивної побудови (5) невідомі коефіцієнти однозначно визначаються за рекурентною процедурою (6), а поліном (3), що має вигляд (5), є інтерполяційним на множині $\mathfrak{Z}(m)$. З урахуванням останнього, дістанемо $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F) \equiv b_{i_1 i_2 \dots i_k}$. Отже, інтерполяційні поліноми виду (5) на послідовності вузлів $\mathfrak{Z}(m)$ тотожно співпадають. При цьому побудований для поліноміального оператора таким чином інтерполяційний поліном $P_{m,n1}(x)$ – єдиний, асимптотично зберігає багаточлени того ж степеня [6] і для його побудови необхідно знати лише інформацію про значення оператора у вузлах.

Нехай надалі в нулі задані значення оператора $F(x)$ та його диференціали Гато до n -го порядку включно за напрямками $e_i \in X$, $i = \overline{1, m}$, що є першими елементами ортонормованого базису:

$$F(0), F'(0)e_{i_1}, F''(0)e_{i_1}e_{i_2}, \dots, F^{(n)}(0)e_{i_1}e_{i_2}\dots e_{i_n}, 1 \leq i_j \leq m,$$

де $F^{(k)}(0)z_k z_{k-1} \dots z_1 = \left. \frac{\partial}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2 \dots \partial \alpha_k} F\left(\sum_{j=1}^k \alpha_j z_j\right) \right|_{\alpha_1 = \alpha_2 = \dots = \alpha_k = 0}$ – диференціал Гато

порядку k у нулі за заданими напрямками $z_k, z_{k-1}, \dots, z_1$. Необхідно знайти такий поліном $P_{m,n2} : X \rightarrow Y$, що задовольняє умови

$$P_{m,n2}^{(k)}(0)e_{i_k} \dots e_{i_1} = F^{(k)}(0)e_{i_k} \dots e_{i_1}, k = \overline{0, n}. \quad (7)$$

В [7] побудовано інтерполяційний поліном вигляду

$$P_{m,n2}(x) = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, i_2, \dots, i_k=1}^m \frac{F^{(k)}(0)e_{i_1}e_{i_2}\dots e_{i_k}}{k!} (x, e_{i_1})(x, e_{i_2})\dots(x, e_{i_k}), \quad (8)$$

що відповідає умовам (7). Із результатів роботи [7] випливає, що в скінченновимірних просторах інтерполянт $P_{m,n2}(x)$, що визначається формулою (8), є точним на багаточленах відповідного степеня, а в нескінченновимірних – асимптотично точним.

Розглянемо ще одну інтерполяційну задачу. Нехай задані значення оператора у нулі та його диференціалів Гато у вузлах $e_i \in X$, $i = \overline{1, m}$ за напрямками ортонормованого базису $e_i \in X$, $i = \overline{1, m}$, наступним чином: диференціали Гато першого порядку – у першому вузлі e_1 , другого порядку – у другому вузлі e_2 і т. д. Для нелінійного оператора $F : X \rightarrow Y$, що має похідні Гато до певного порядку включно, потрібно знайти такий поліном $P_{m,n3} : X \rightarrow Y$ степеня n , що відповідає умовам

$$P_{m,n3}^{(k)}(e_k)e_{i_k} \dots e_{i_2}e_{i_1} = F^{(k)}(e_k)e_{i_k} \dots e_{i_2}e_{i_1}, i_1, i_2, \dots, i_k = \overline{1, m}, k = \overline{0, n}, e_0 = 0, \quad (9)$$

де $F^{(k)}(e_k)z_k z_{k-1} \dots z_1 = \frac{\partial}{\partial \alpha_1 \partial \alpha_2 \dots \partial \alpha_k} F(e_k + \sum_{j=1}^k \alpha_j z_j) \Big|_{\alpha_1=\alpha_2=\dots=\alpha_k=0}$ – диференціал

Гато порядку k у вузлі e_k за заданими напрямками $z_k, z_{k-1}, \dots, z_1$. Умови (9) надалі будемо називати інтерполяційними умовами типу Абеля-Гончарова [10]. Їх число дорівнює $1+N$. Відмітимо, що вони є частинним випадком інтерполяційних умов типу Ерміта-Біркхофа.

Інтерполянт $P_{m,n3}(x)$ з інтерполяційними умовами (9) будемо шукати у вигляді (5). Для його конструктивної побудови необхідно визначити невідомі, симетричні відносно своїх індексів, коефіцієнти $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$, $k = \overline{1, n}$, число яких дорівнює $1+N$. На підставі (5) та враховуючи, що система елементів $e_i \in X$, $i = \overline{1, m}$ – ортонормована, дістанемо

$$P_{m,n3}^{(j)}(e_j; F) e_{i_j} \dots e_{i_2} e_{i_1} = \sum_{k=0}^{n-j} (k+1) \dots (k+j) a_{i_1 i_2 \dots i_j \underbrace{j \dots j}_k}(F) \quad (10)$$

Покладемо в (10) $j=n$, одержимо $P_{m,n3}^{(n)}(e_n; F) e_{i_n} \dots e_{i_2} e_{i_1} = n! a_{i_1 i_2 \dots i_n}(F)$. Отже, на підставі інтерполяційних умов (9), отримаємо

$$a_{i_1 i_2 \dots i_n}(F) = \frac{F^{(n)}(e_n) e_{i_n} \dots e_{i_2} e_{i_1}}{n!}, \quad i_1, i_2, \dots, i_n = \overline{1, m}. \quad (11)$$

Якщо в (10) $j=n-1$ (коефіцієнти $a_{i_1 i_2 \dots i_n}(F)$ вже знайдені за формулою (11)), то дістанемо формулу для визначення $a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}}(F)$

$$a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1}}(F) = \left\{ F^{(n-1)}(e_{n-1}) e_{i_{n-1}} \dots e_{i_2} e_{i_1} - 1 \cdot 2 \dots (n-1) n a_{i_1 i_2 \dots i_{n-1} n-1}(F) \right\} / (n-1)!, \\ i_1, i_2, \dots, i_{n-1} = \overline{1, m}.$$

Нехай в (10) $j=n-2$, знайдемо $a_{i_1 i_2 \dots i_{n-2}}(F)$:

$$a_{i_1 i_2 \dots i_{n-2}}(F) = \left\{ F^{(n-2)}(e_{n-2}) e_{i_{n-2}} \dots e_{i_2} e_{i_1} - 2 \cdot 3 \dots (n-1) a_{i_1 i_2 \dots i_{n-2} n-2}(F) - \right. \\ \left. - 3 \cdot 4 \dots n a_{i_1 i_2 \dots i_{n-2} n-2 n-2}(F) \right\} / (n-2)!, \quad i_1, i_2, \dots, i_{n-2} = \overline{1, m}.$$

Послідовно покладаючи в (10) $j=n, n-1, \dots, 1$ та враховуючи інтерполяційні умови (9), визначимо всі невідомі коефіцієнти $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$, $k = \overline{1, n}$, що містяться в (5), $a_0(F) = F(0)$. Наведену рекурентну процедуру можна записати у вигляді наступної формули

$$a_{i_1 i_2 \dots i_j}(F) = \frac{1}{j!} F^{(j)}(e_j) e_{i_j} \dots e_{i_2} e_{i_1} - \sum_{k=1}^{n-j} C_{k+j}^k a_{i_1 i_2 \dots i_j \underbrace{j \dots j}_k}(F), \quad a_0(F) = F(0) \quad (12) \\ i_1, i_2, \dots, i_j = \overline{1, m}, \quad j = n, n-1, \dots, 1, \quad \sum_{k=1}^0 = 0.$$

Таким чином інтерполяційний поліном $P_{m,n3}(x)$ – повністю визначений.

Надалі, нехай $F(x) \equiv F_n(x) \in \Pi_n$, $F_n(x) = L_0 + L_1x + L_2x^2 + \dots + L_nx^n$. При заміні аргументу в $F_n(x)$ відрізком ряду Фур'є за першими m елементами ортонормованого базису $0, e_1, e_2, \dots, e_m$ простору X дістанемо формулу (5), де замість коефіцієнтів $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$ будуть $L_k(e_{i_1}, e_{i_2}, \dots, e_{i_k})$. Враховуючи, що система вузлів інтерполювання $0, e_1, e_2, \dots, e_m$ є базисом підпростору простору X , дістанемо, що $P_{m,n3}(x) \equiv F_n(x)$ на підпросторі, що утворений $0, e_1, e_2, \dots, e_m$. На всьому просторі X інтерполяційний поліном $P_{m,n3}(x)$ співпадає з $F_n(x)$, коли $m \rightarrow \infty$, тобто асимптотично. Таким чином має місце

Теорема 1. *Інтерполяційний поліном $P_{m,n3}(x)$, що визначається формулами (5), (12), є гранично інваріантним відносно багаточленів відповідного степеня.*

Наведене твердження є істотним при розв'язанні прикладних задач, оскільки при збільшенні числа вузлів, побудовані інтерполянти асимптотично зберігають поліноми того ж степеня, що є важливим для одержання оцінок точності. В роботі розглянуто два інтерполянти з інтерполяційними умовами, що містять похідні. Для знаходження інших інтерполянтів вигляду (5) необхідно задати такі інтерполяційні умови, щоб система рівнянь відносно невідомих коефіцієнтів $a_{i_1 i_2 \dots i_k}(F)$, $k = \overline{1, n}$ із (5) була однозначно розв'язувана.

Надалі наведемо один із операторних інтерполяційних поліномів ньютонівського типу [3], що є розв'язком задачі (2) та має властивість збереження багаточленів відповідного степеня для поліноміальних операторів. Припустимо, що оператор $F(x)$ має диференціали Гато до певного порядку включно за заданими напрямками. Нехай $x_0, x_1, \dots, x_n \in X$ фіксовані точки включно за заданими напрямками. Нехай $x_0, x_1, \dots, x_n \in X$ фіксовані точки (вузли інтерполювання). Інтерполяційний поліном типу Ньютона має вигляд [3]

$$N_n[F; x] = F(x_0) + \sum_{k=1}^n F[x_0, x_1, \dots, x_k](x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1}), \quad (13)$$

де $F[x_0, x_1, \dots, x_k]$ визначаються наступним чином:

$$F[x_0, x_1, \dots, x_k] h_k h_{k-1} \dots h_1 = \int_a^b \int_a^{\tau_1} \dots \int_a^{\tau_{k-1}} F^{(k)}[x_0 + \sum_{i=1}^k \tau_i (x_i - x_{i-1}); h_k \dots h_1] d\tau_k \dots d\tau_1, \quad (14)$$

$\tau_i \in [a, b]$ – деякі числові параметри. Відмітимо, що подібні інтерполяційні структури розглянуто в [4].

Побудовані в [3], [4] інтерполяційні поліноми Ньютона є точними на поліномах відповідного степеня, в той час як інтерполяційні поліноми Лагранжа (5), (6), Ерміта (8) та інтерполянт, що визначається формулами (5), (12), мають властивість асимптотичного збереження багаточленів відповідного степеня. Але застосування наведених формул (13), (14) на практиці є достатньо складним, оскільки для визначення розділених різниць вищих порядків в (13)

потрібно обчислювати кратні інтегралами від операторних диференціалів відповідного порядку. Побудова інтерполяційного полінома $P_{m,n1}(x)$ вимагає лише вузлових значень оператора, а $P_{m,n2}(x)$ та $P_{m,n3}(x)$ – значень оператора у нулі та його диференціалів Гато у вузлах (обраних певним чином) за відповідними напрямками.

ЛІТЕРАТУРА

1. В.Л.Макаров, В.В.Хлобыстов, Л.А.Янович. Интерполирование операторов. Киев „Наукова думка”. – 2000. – 468с.
2. В.Л.Макаров, В.В.Хлобыстов. Основы теории полиномиального операторного интерполирования. НАН України. Ін-т математики. – Київ, 1998. – 278с.
3. Егоров А.Д., Соболевский П.Н., Янович Л.А. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов. – Минск. Наука и техника, 1985. – 310с.
4. Fillipson L. Kergin interpolation in Banach Spaces // Journal of Approximation Theory 127(2004). – P.108–123.
5. В.В.Хлобыстов, О.Ф.Кашпур. Операторний інтерполянт типу Ерміта в гільбертовому просторі, що є асимптотично точним на поліномах // Вісник Київського університету: серія фізико-математичні науки. – 2005. – №2. – С.316–324.
6. В.В.Хлобыстов, О.Ф.Кашпур, Т.Н.Поповичева. Операторні інтерполянти в гільбертовому просторі асимптотично точні на поліномах // Вісник Київського університету: серія фізико-математичні науки. – 2005. – №4.
7. Хлобыстов В.В., Поповичева Т.Н. Об интерполяционном приближении дифференцируемых операторов в гильбертовом пространстве. // УМЖ. – 2005, (в печати).
8. W.A.Porter. An overview of polynomic system theory. // IEEE Proc. Special issue on system theory. – v.64, №1. – 1976. – P 18 – 26.
9. В.В.Хлобыстов, Е.Ф.Кашпур. К задаче интерполирования полиномиальных операторов // Кибернетика и системный анализ. – 1996. – №3. – С.102 – 108.
10. Евграфов М.А. Интерполяционная задача Абеля-Гончарова. – М, 1954.
11. Пупков К.И., Капалин В.И., Ющенко А.С. Функциональные ряды в теории нелинейных систем. – М.: Наука, 1976. – 448с.

УДК 681.3

Олександр В. Шевченко*

Розробка архітектури агента-здобувача тематичної інформації

Пропонується концепція побудови архітектури інформаційного агента, призначеного для формування тематичних індексів електронних документів і добування тематичної інформації із мережі. Для оцінки ймовірності появи документів у колекції документів і частоти входження термів в документи використовуються метод імовірнісного латентного семантичного індексування, фільтр ядра індексу і фільтр архіву запитів користувачів. Розглянуті основні функції інформаційного агента.

Ключові слова: Інтернет, інформація, пошук, індекс, агенти.

Olexandr V. Shevchenko*

Agent architecture for subject information search development

A conception of information agent architecture development is proposed. This agent is designed for subject indices of electronic documents formation and extraction of subject information from the network. For the evaluation of document entry probability into a document collection and terms entry frequency into a document the method of probability latent semantic indexing, index kernel filter, and filter of users' queries archive are used. Major functions of information agent are examined.

Key words: Internet, information, search, index, agents.

*E-mail: sheva@unicyb.kiev.ua

Вступ

Мережа інформаційних ресурсів WWW Інтернет призначена для зберігання розподіленої гетерогенної інформації та доступу до неї за допомогою єдиної системи іменування ресурсів, загальних протоколів звернення до них та методів навігації по цим ресурсам. Кожен ресурс має власну унікальну адресу URL (Universal Resource Locator) і представлений орієнтованим розміченим графом у стандарті RDF (Resource Description Framework) або тезаурусом [1, 2].

Типами ресурсів, що зберігаються у мережі Інтернет є: окремі документи, сукупності (колекції) документів, тематичні області, інформаційні пошукові системи тощо [3-5]. Ці ресурси отримують індекси, необхідні при аналізі, виділенні ознак предметної області і внесенні їх в індекс, а також при добуванні тематичної інформації, ранжируванні результатів та відправки їх користувачеві у відповідь на його запит. Дії щодо індексування ресурсів мережі та формування відповідей на запити виконують агенти різного рівня. Особливо місце серед них займає агент – здобувач тематичної інформації (надалі інформаційний агент), яку запитує користувач [3, 4].

Запит містить ключові слова, зв'язані логічними операторами, та набір параметрів, які задають розмір, дату створення, мову опису документа, форму збереження, а також засоби пошуку інформаційних ресурсів в Інтернет.

Відповідь на запит містить ідентифікатор користувача, дату створення документу, розмір документу, анотацію до документу, статус документу тощо.

В даній роботі пропонується архітектура та функції інформаційного агента, що орієнтовані на підвищення швидкості отримання відповіді на запит та поліпшення точності результату пошуку.

1. Підхід до побудови інформаційного агента

Основу підходу складає метод імовірнісного латентного семантичного індексування (LSI), який використовується для оцінки частоти входження терму в документ та імовірності появи документів у колекції відповідно до фактору (звуженої теми колекції множини документів), відображеного в індексі.

Запропонований метод використовує посилання на нові або раніше завантажені документи, що визнані релевантними у тематиці індексу. Інформаційний агент відповідно формує нові тематичні індекси або поповнює індекс новими посиланнями на релевантні документи. Середнє відхилення тематики завантажених документів від заданого тематичного напрямку мінімізується шляхом пошуку деякої базової колекції (ядра) документів та розглядом нової теми, раніше не представлені в документах ядра.

Головними принципами розробленого підходу є зниження вартості пошуку за рахунок розбивки тематичної області на більш вузькі. Фільтрація завантажених документів та побудова нової колекції документів шляхом аналізу архіву запитів і ядра індексів.

2. Розробка архітектури агента

Виходячи з запропонованого, функція аналізу документів агента починається з ядра множини HTML, завантаження тих документів, на які посилаються документи з ядра, включення в індекс інформації про документи, що проходили через фільтр на основі аналізу ядра.

Агент виконує функцію доступу до інформації індексу колекції документів D :

$tf(d, t)$ – кількість входжень терму t у кожний проіндексований документ $d \in D$ для кожного терму $t \in T(d)$;

Аналізатор ядра індексу готує інформацію для генерації тематичних фільтрів, яка складається з обчислених ваг усіх термів з $T(K(D))$ ядра індексу $K(D)$. Агент визначає сховані фактори (теми) у колекції документів D і за допомогою функції $tf(t, d)$ визначає число входжень терму t у документ d , чим забезпечується ефективно обчислення ваг термів, необхідних для вирішення задачі аналізу ядра індексу. На кожному кроці визначається число точок, у яких оцінюється значення таких функцій:

$$P(z) = |z| \text{ (з діапазону 50-150);}$$

$$P(t | z) = |Z| \times |T(K(D))|;$$

$$P(d | z) = |Z| \times |K(D)|;$$

$$P(z | d, t) = |Z| \times |K(D)| \times |T(K(D))|.$$

Зменшення обсягу обчислень для цих функцій досягається при таких обмеженнях:

$$P(z | d, t) = 0, \text{ якщо } tf(t, d) = 0.$$

Наведені оцінки показують, що для колекції документів великого розміру і росту обсягів обчислень, краще, коли ядро індексу невеликих розмірів.

Аналізатор архіву запитів. На основі аналізу запитів користувачів, що звернулися раніше до даного індексу, побудовано фільтр запитів та обчислені ваги термів із запитів за допомогою об'ємної статистики у базі даних. Для термів запитів, що зустрічаються у ядрі індексу, за вагу вибираються ті значення, що обчислені за методом ІЛСІ. Тобто терми, що увійшли в запит користувача, з великою імовірністю семантично зв'язані з відомими термами ядра і тому оцінка ваг нових термів виконується за допомогою ваг вже відомих термів.

Генератор тематичних фільтрів. При вирішенні задач пошуку документів як фільтр використовується зважена множина термів. Новий документ проходить крізь фільтр, якщо сума добутків ваг термів, загальних для фільтра і документа, на частоту входження цих термів у новий документ перевищує деякий поріг. Вибір числа термів, що включаються в ці фільтри, з метою визначення і вибору порогів в основному здійснюється експериментально.

Завантаження документів з мережі Інтернет виконується за допомогою повідомлення URL і стандартної утиліти **WGET** системи Linux. Документи заносяться до спеціальної керованої черги.

Розбір документів для всіх термів t завантаженого документа d завершується обчисленням величини $tf(d, t)$, яка необхідна при фільтрації нового документа. У випадку, якщо новий документ є релевантним тематиці індексу, то з тексту документа виділяються посилання на нові документи для наступного їх завантаження і аналізу.

Фільтрація документів. При наявності двох фільтрів на етапі прийняття рішення про визнання нового документа релевантним

тематичі індексу здійснюється їхня інтеграція. Документ визнається релевантним тематичі індексу, якщо він проходить через один із цих двох фільтрів.

Керування чергою посилок. Число посилок до раніше переглянутих і визнаних релевантними документів росте дуже швидко. Посилання ставляться у чергу, від ефективної організації якої залежить ефективність роботи агента, яка вимірюється відношенням числа завантажених релевантних документів до загального числа релевантних документів. Керування чергою посилок базується на імовірнісній оцінці релевантності документу, на який указує посилання.

3. Фільтр ядра індексу

Новий документ, завантажений з Інтернет, розміщується у колекції, якщо він пройшов через фільтр колекції або через фільтр запитів.

Отримання фільтра ядра індексу виконується шляхом його генерації. Величина $Z = \{z_i \mid i = 1, \dots, k\}$ позначає множину, так званих схованих (латентних) факторів вузьких тем ядра індексу. За методом ІЛСІ обчислюються оцінки наступних видів ймовірностей:

- $P(z_i)$, коли випадково обраний з ядра індексу документ найкраще співвідноситься з тематикою z_i ,
- $P(d_i \mid z_i)$, коли для заданій тематичі z_i документ d_i найкраще співвідноситься з тематикою z_i ,
- $P(t_i \mid z_i)$, коли для заданої тематики z_i , терм t_i найкраще співвідноситься з тематикою z_i .

Для всіх термів зі словника ядра індексу $T(K(D))$ ваги термів обчислюються за формулою

$$W(t) = P(z_1) P(t \mid z_1) + P(z_2) P(t \mid z_2) + \dots + P(z_k) P(t \mid z_k), t \in T(K(D)) \quad (1)$$

В цій формулі

$$P(z_1) + P(z_2) + \dots + P(z_k) = 1, P(t \mid z_1) + P(t \mid z_2) + \dots + P(t \mid z_k) = 1, t \in T(K(D)).$$

У фільтр ядра індексу включається інформація про ті тематики, що представлені в ядрі явно, тобто вони становлять інтерес з тематики z з відносно великою вагою $P(z)$. При цьому вибираються терми t , що описують тематику z , і мають велику вагу $P(t \mid z)$.

У формулі (1) ваги тематики $P(z)$ і термів тематики $P(t \mid z)$ перемножуються. Підсумовування по всіх тематиках дозволяє виділити терми, що грають важливу роль в описі декількох важливих для індексу тематик. За фільтр колекції обирається задана кількість слів зі словника колекції з найбільшими вагами.

4. Фільтр запитів користувачів

У цей фільтр входять тільки ті терми, що зустрічаються в архіві запитів. Серед них є як терми зі словника ядра індексу, так і терми з нових тем ядра індексу.

Ваги термів зі словника ядра обчислюються при побудові фільтра ядра індексу за формулою (1). Для обчислення ваг нових термів створюються фільтри запитів та зважений граф G запитів. Вхідні дані беруться з архіву запитів користувачів та з аналізу ядра колекції. За допомогою графа G і методу простої ітерації обчислюються ваги термів. Результатом є фільтр запитів у такому вигляді:

$$\{t, W(t) : t \in T_{old}\} \cup \{t, X(t) : t \in T_{new}\}.$$

При цьому передбачається, що в одному запиті $t_1 OR t_2 OR \dots OR t_n$ два терми зустрічаються з відносно великою імовірністю їх семантичної близькості один до одного. Операції OR вказують про семантичну близькість довільних трійок та четвірок з групи термів. В один запит включаються терми з різною семантикою і тому імовірність семантичної близькості двох термів одного запиту може бути досить велика, а імовірність груп із трьох і більш термів – дуже мала.

Багаторазове входження деякої пари термів у запит користувача підвищує імовірність семантичного зв'язку між цими термами. При обліку частоти входження пари термінів у запити відбувається переоцінка семантичного зв'язку термів. Практично враховується інформація про входження тільки двох термів і не враховується частота такого входження.

Для оцінки ваг термів використовується неорієнтований граф $G(V, E)$, вершинами якого V – є усі терми, що зустрічаються в архіві запитів. Дві вершини t_1, t_2 з'єднані ребром $(t_1, t_2) \in E$, якщо ці два терми зустрічаються разом в одному запиті. Оцінка ваги нового терму здійснюється за принципом: вага нового терму вважається рівною середньому арифметичному значенню ваг усіх слів, що є сусідами даного слова в графі G . Введемо позначення:

$Q = \{q_1, \dots, q_r\}$ - множина запитів з архіву запитів користувачів,

$T(Q) = T(q_1) \cup T(q_2) \cup \dots \cup T(q_r)$ - словник архіву запитів,

$T_{old} = T(Q) \cap T(K(D))$ - множина термів зі словника архіву запитів, що входять у словник ядра індексу,

$T_{new} = t(D) - T_{old}$ - множина термів зі словника архіву запитів, що не входять у словник ядра індексу,

$W(t)$ - вага терму $t \in T_{old}$, обчисленого за формулою (1),

$X(t)$ - невідома вага терму $t \in T_{new}$.

$N_G(t)$ - множина термів з $T(Q)$, яким у графі G відповідають вершини, суміжні з вершиною, відповідною терму t . Інакше:

$$N_G(t) = \{t' / (t, t') \in E\}.$$

Оцінка $W_{new(t)}$ ваг термів t з множини T_{new} обчислюються шляхом розв'язання наступної системи лінійних рівнянь:

$$X(t) = \frac{\sum_{t' \in T_{old} \cap N_G(t)} W(t') + \sum_{t' \in T_{new} \cap N_G(t)} X(t')}{|N_G(t)|}, \quad (2)$$

де t пробігає по всій множині T_{new} .

Розглянемо питання розв'язання системи (2), як системи, яка має вигляд $X = B X + C$. Вектор X утворений невідомими вагами термів із $T_{new} = \{t_1, \dots, t_s\}$ і $X = (X(t_1), \dots, X(t_s))^T$.

Матриця B має розмірність $s \times s$, C – деякий постійний вектор розмірності s , тобто

$$B = (b_{ij}), b_{ij} = 1/|N_G(t'_j)|, t_i \in T_{new} \cap N_G(t'_j);$$

$$C = (c_i), c_i = \sum_{t' \in T_{new} \cap N_G(t_i)} W(t')/|N_G(t_i)|.$$

• **Теорема.** Метод простої ітерації

$$X(i+1) = B X(i) + C, i = 0, \quad (3)$$

збігається до розв'язку системи (2) при будь-якому початковому наближенні X^0 , якщо для кожного терму $t \in T_{new}$ є запит $q \in Q$, у який входить терм t і хоча б один $t' \in T_{old}$.

• **Доведення.** Відомо, що метод простої ітерації (3) збігається тоді і тільки тоді, коли усі власні значення матриці B по модулю строго менше 1. Для виконання цієї умови достатньо, щоб виконувалося умова:

$$\sum_{j=1}^s |b_{ij}| < 1, \text{ для } i = 1, \dots, s; \text{ тут } B = (b_{ij}).$$

При наявності для кожного $t \in T_{new}$ запиту $q \in Q$ такого що в q входить терм t і деякий терм $t' \in T_{old}$ отримаємо, що для будь-якого $t \in T_{new}$,

$$|T_{new} \cap N_G(t)| / |N_G(t)| < 1,$$

$$\text{але } |b_{i1}| + |b_{i2}| + \dots + |b_{is}| = (|T_{new} \cap N_G(t)| / |N_G(t)|) < 1,$$

що і завершує доведення твердження.

Можлива ситуація, коли в околі $N_G(t)$ деякого терму $t \in T_{new}$ немає жодного терму p множини T_{old} . У цьому випадку збіжність методу простої ітерації не гарантована і в цьому випадку виконується тактика тимчасового видалення з архіву запитів усіх запитів з термом t . Після включення нового запиту з термом t в архів і хоча б одного терму з T_{old} в архів повертаються вилучені запити і переглядаються ваги всіх термів з T_{new} . У фільтр запитів включаються задане число слів, що зустрічається в архіві з найбільшими вагами.

При зіставленні нового документа з фільтром обчислюється скалярний добуток *tf* -файлу документу з фільтром. Документ проходить крізь фільтр, якщо цей скалярний добуток перевищує заданий поріг.

Висновки

Розроблено функції інформаційного агента і його архітектуру, продемонстровано можливий підхід до формування тематичних індексів електронних документів, фільтра ядра індексу та фільтра запитів. Запити користувачів поповнюють індекс інформацією про документи, релевантні потребам більшості користувачів. Запропоновано метод простої ітерації для обчислення ваг термів. Все це забезпечує більш швидкий і точний пошук тематичної інформації в мережі Інтернет.

Література

1. Gudivada V.N., Raghavan V.V. Information Retrieval on the Word Wide Web// IEEE Internet Computing.-1997.-v1, №5. - p.58-68.
2. Гинберг И., Гарбер Ли. Разработка новых технологий информационного поиска // Открытые системы.- 1999.-№10. - с.45-52.
3. Шевченко А.В. Підходи до здобування тематичної інформації із мережі Інтернет // Вісн. Київськ. ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки, 2006. - № 1 - с.156 - 160.
4. Lesser V.R. Multiagent System //ACM Computing Surveys.-1995.-v.27 Sept. - p.340-342.
5. Кураленюк И.Е. Автоматическая классификация документов с использованием семантического анализа // Программирование, М.: 2000, № 4. - с.31-41.
6. Трахтенгерц С.А. Взаимодействие агентов в многоагентных средах //Автоматика и телемеханика.- М.: Наука.-1998.-№8. - с.3-52.
7. David R.N. Miller, Tim Leek, Richard M. Schwartz. A hidden Markov Model Information Retrieval System// SIGIR 99.- Berkley, CA USA. - p. 214-221.

Надійшла до редакції 15.06.2005

РАДІОФІЗИКА

УДК 533.952:537.523.5

Анатолій М. Веклич*,
Павло В. Порицький*

Теплова контракція дуги в мідній парі

Розглянуто вплив характеристик газового середовища на процес контракції (стягування) дугового розряду високого тиску в сумішах міді з азотом або інертним газом. Проведені розрахунки і показано, що ступінь стягування дугового розряду визначається теплофізичними характеристиками газового середовища та характеристиками електрон-атомних зіткнень. Розглянуто взаємний вплив ефекту Рамзауера та резонансу форми на характер контракції дугового розряду. Показана можливість нейтралізації впливу ефекту Рамзауера на контракцію дуги в газовій суміші. Розглянуто вплив дисоціативної та іонізаційної складових теплопровідності на характер контракції дуги в молекулярному газі.

Ключові слова: електрична дуга, плазма, контракція, теплопровідність.

Anatoly M. Veklich*,
Pavlo V. Porytskyi*

Thermal contraction of an arc in copper vapours

The influence of properties of gaseous medium on the processes of contraction (self-constriction) of an arc discharge in the atmosphere of the mixture of copper with nitrogen or noble gas is considered. The calculation are carried out, and it is shown that the degree of constriction of an arc discharge is determined by both the thermophysical characteristics of gaseous medium and the effective characteristics of electron-atom collisions. It is studied the influence of both the Ramsauer effect and shape resonance on a character of contraction of an arc discharge. Also it is shown that the influence of the Ramsauer effect on the contraction of an arc may be neutralized in gaseous mixtures. The influence of both the dissociative heat conductivity and ionization one on the contraction of an arc in molecular gas.

Key words: electric arc, plasma, contraction, heat conductivity.

*E-mail: van@univ.kiev.ua, poryts@kinr.kiev.ua

Вступ

Контракція (стягування) дугового розряду полягає у зменшенні області, що займає газорозрядна плазма, внаслідок підвищення розрядного струму або зовнішнього тиску. Для дуг середнього та високого тиску характерна теплова контракція, яку зумовлює те, що температура на периферії розряду падає, а густина газу (при постійному тиску) росте [1-3]. Тому на периферії електрони віддають більшу енергію нейтралам, і їх температура падає, що, в свою чергу, призводить до зменшення концентрації електронів внаслідок посилення процесів рекомбінації.

Контракцію часто розглядають як негативне явище, що обмежує практичне використання дугових розрядів [3,4]. З іншого боку, в окремих випадках, саме контракція розряду може бути необхідною передумовою для можливості застосування дугових розрядів [5].

Величина енергії, що передається від електронів до важких частинок, сильно залежить від типу цих частинок (атоми, іони, молекули, кластери тощо). Зокрема, переріз електрон-атомних зіткнень може мати немонотонну залежність від енергії електрона: глибокий мінімум спостерігається для деяких інертних газів та лужних металів (ефект Рамзауера), що має суттєвий вплив на параметри плазми. Тому для дугових розрядів у різних газових середовищах процес контракції має суттєво відмінний характер.

Слід також звернути увагу на те, що крім ефекту Рамзауера, при розсіянні електрона на атомах, можуть мати місце також резонансні процеси. Так, згідно з [6], для розсіяння електронів низьких енергій на атомі міді наявний ефект резонансу форми, пов'язаний з утворенням квазістаціонарного стану негативного іона.

Мідь є одним із широко вживаних матеріалів електродів, і тому її атоми часто стають складовою газорозрядного середовища. Слід підкреслити, що питання про вибір моделі перерізу розсіяння електронів низьких енергій на атомі міді залишається відкритим (див. [7-9]). Найбільш значущими видаються дві моделі: вказана вище модель із резонансом форми (резонансна) [6] та модель без такого резонансу (нерезонансна) [7,8].

Метою даної роботи є дослідження впливу фізичних характеристик газорозрядної плазми із вмістом міді на теплову контракцію дугового розряду. Для досягнення цієї мети проведемо аналіз процесів, що викликають теплову контракцію, припускаючи при цьому, що електронна та газова температури в плазмі дуги відмінні.

2. Модель дугового розряду

Стан плазми дугового розряду середнього та високого тиску прийнято характеризувати як стан локальної термодинамічної та іонізаційної рівноваги (ЛТР) [2,3]. Внаслідок високих концентрацій важких частинок та електронів зіткнувальні процеси в такій плазмі значно більш суттєвіші, ніж дифузійні процеси. Отже, для такої плазми перенесення частинок під впливом просторової неоднорідності незначне, і в кожній точці розряду підтримується стан близький, до рівноважного. Він характеризується певними газовою (газу важких частинок) T та електронною T_e температурами.

Ці температури встановлюються внаслідок процесів взаємодії електронів із зовнішніми полями, зіткненнями електронів з атомами та перенесення тепла у перерізі розряду. Водночас співвідношення між T і T_e визначається тільки зіткнувальними процесами та взаємодією електронів із зовнішнім електричним полем.

Слід зазначити, що наявність ЛТР у плазмі підтверджується експериментально для стабілізованих стінками дуг та для стовпа відкритих дуг у мідній парі [10-12]. Проте, внаслідок перенесення резонансного випромінювання, у приелектродних шарах і на периферії відкритих мідних дуг

рівноважний стан може порушуватися [12].

Розглянемо плазму дугового розряду циліндричної форми за умови наявності ЛТР і сталості тиску. Припускаючи інтенсивність тепловиділення пропорційною до локальної густини струму, запишемо рівняння перенесення тепла (рівняння Еленбааса-Геллера [2,3,9]) у вигляді:

$$\frac{1}{r} \cdot \frac{d}{dr} \left\{ r \left[\kappa_h^*(T) \frac{dT}{dr} + \kappa_e^*(T_e) \frac{dT_e}{dr} \right] \right\} + q(r) = 0. \quad (1)$$

Тут r – відстань від осі розряду; $\kappa_h^*(T) = \kappa_g(T) + \kappa_{nd}(T) + \kappa_{ion}(T)$ – сумарний коефіцієнт теплопровідності важких частинок (газова теплопровідність), $\kappa_g(T)$ – коефіцієнт теплопровідності нейтрального газу, $\kappa_{nd}(T)$ – коефіцієнт теплопровідності внаслідок процесу дисоціації, $\kappa_{ion}(T)$ – коефіцієнт теплопровідності іонів; $\kappa_e^*(T_e) = \kappa_e(T_e) + \kappa_n(T_e)$ – сумарний коефіцієнт теплопровідності електронів; $\kappa_e(T_e)$ – коефіцієнт теплопровідності електронів, $\kappa_n(T_e)$ – коефіцієнт теплопровідності внаслідок процесу іонізації; $q(r) = j(r)E$ – потужність тепловиділення в одиниці об'єму; $j(r) = \sigma E$ – густина електричного струму; E – напруженість електричного поля, σ – електропровідність плазми.

Рівняння (1) описує перенесення тепла у перерізі розряду з урахуванням сумарних газової та електронної теплопровідностей, і поле температур у дузі визначатиметься із розв'язку цього рівняння. Крайові умови виберемо наступним чином: температура в центрі дуги $T(0) = T_0$, а значення температури на стінці розрядної камери ($r = R$) T_R (без обмеження загальності розгляду) покладемо рівним деякій сталій (наприклад, 300 К або 400 К).

Внаслідок наявності ЛТР в області плазми, яка визначає її енергобаланс, температура електронів і газу змінюється мало. Це дозволяє отримати наближений аналітичний розв'язок рівняння (1) методом, який докладно викладений в роботах [3,13]. Згідно цього методу, отримуємо наступну систему алгебраїчних рівнянь для розрахунку параметрів дугового розряду:

$$T_e - T = \left(\frac{E}{N} \right)^2 \cdot g(T_e), \quad (2) \quad p + \Delta p = NkT + n_e kT_e, \quad (5)$$

$$I = \sigma E \cdot \pi r_0^2, \quad (6)$$

$$Q = IE = \frac{\pi k T_e^2}{E_1} \left[16 \kappa_h^* \zeta_T \left(\frac{1}{1 + (r_g/R)^2} \right) + 5 \kappa_e^* \right], \quad (3) \quad \frac{n_e n_{ion}}{n_{air}} = K_{ion}(T_e), \quad (7)$$

$$S = 0.215 q_0 r_0^2 \ln \left(\frac{R}{r_0} \right), \quad (4) \quad \frac{n_{a\beta}^2}{n_{M\beta}} = K_{a\beta}(T). \quad (8)$$

Тут I – струм дуги, Q – потужність енерговиділення на одиницю довжини розряду, R – радіус стінки розрядної камери, E_1 – ефективна

енергія іонізації газового середовища, P – зовнішній тиск, Δp – кулонівська поправка до тиску, k – стала Больцмана, N – густина важких частинок, n_e – густина електронів, n_a , n_m , n_i – густини атомів, молекул та іонів, відповідно (індекси α і β вказують на сорт частинок), $K_{ia}(T_e)$ та $K_{dp}(T)$ – відповідні константи іонізації та дисоціації; S – теплова функція (функція теплового потенціалу), $g(T_e)$ – функція електронної температури, $q_0 = \sigma E^2$, $\zeta_T = \frac{dT}{dT_e}$, а r_0 – характерний радіус плазми (радіус контракції), причому

$r_0^2 \approx 1.32r_g^2 + r_j^2$, де r_g та r_j – характерні радіуси контракції за домінування газової або електронної теплопровідності в процесі перенесення тепла, відповідно. Ці радіуси обчислюються, виходячи з наступних співвідно-

шень: $r_g^2 = \frac{16kT_e^2 \kappa_h^* \zeta_T}{q_0 E_1}$, $r_j^2 = \frac{11.6kT_e^2 \kappa_e^*}{q_0 E_1}$. Зазначимо, що фізичний зміст радіусу контракції в даній моделі полягає в тому, що на цій відстані від осі розряду густина струму спадає приблизно в 15–20 разів (див. [9,13]).

Додатковими умовами до даної системи є умови квазінейтральності плазми $n_e = \sum_{\alpha} n_{\alpha}$, а також умови сталості електричного поля ($E = \text{const}$), зовнішнього тиску ($p = \text{const}$), а також збереження маси (для суміші із молекулярним газом). Ефекти неідеальності плазми враховувались так само, як і в роботах [13,14].

Теплова функція S визначається так:

$$S = \int_{T_a}^{T_e} \kappa_e^*(T') dT' + \int_{T_a}^T \kappa_h^*(T') dT'. \quad (9)$$

Транспортні коефіцієнти розраховувались наступним чином. Коефіцієнти електропровідності та електронної теплопровідності обчислювались так само, як і в [9,13,14], а іонна теплопровідність за формулою, аналогічною електронній. Транспортні перерізи розсіяння електронів на атомах для інертних газів брались з [15], а для азоту – з [16]. Реактивні теплопровідності розраховувались згідно теорії Брокау [17]. Теплопровідність нейтральних газів обчислювалась за першим наближенням методу Чепмена-Енскога, а газових сумішей – із використанням формули Васильєвої (див. [13,14,18,19]). При розрахунках теплопровідності припускався модельний потенціал Леннарда-Джонса для взаємодії частинок (див. табл.1). У випадку молекулярного газу його теплопровідність обчислювалась за модифікованою кореляцією Ейкена-Гіршфельдера [18,19].

Система рівнянь (2-8) дозволяє для заданих величин дугового струму I , тиску P і радіуса R визначити на осі розряду величини $E, T_e, T, n_e, n_a, N, r_0$.

Слід підкреслити, що система (2-8) описує дуги, коли тепло, яке виділяється у плазмовому каналі, переноситься за рахунок теплопровідності на стінки розрядної камери, температура T_R яких підтримується сталою. Такі умови безпосередньо відповідають стабілізованим дугам. Однак, стабілізуюча стінка може мати умовний характер; її роль можуть відігравати зовнішні фактори: потоки газу, зумовлені зовнішнім обдуванням, конвекцією, випаровуванням поверхні електродів (див.[5,9,20]). Для цього випадку (відкрита дуга), зазвичай, радіусом стінки рекомендовано вважати радіус світіння розряду [21].

Експеримент

Дуга ініціювалась між вертикально розташованими торцевими поверхнями неохолоджуваних плавких мідних електродів у повітрі. Міжелектродний проміжок складав 8 мм. Діаметр d стрижневих електродів складав 6 мм. Для запобігання каплеутворення електродного матеріалу використовувався імпульсний режим: імпульс струму до 100 А накладався на "черговий" розряд слабого струму (3.5 А). Тривалість імпульсу складала приблизно 30 ms.

Внаслідок просторової та часової нестабільності використовувався метод однократної томографічної реєстрації випромінювання спектральних ліній. Запис радіального розподілу інтенсивності випромінювання нестационарної дуги у довільному перерізі здійснювався практично одночасно впродовж одного імпульсу струму [12,22-25].

Таким чином, можна вважати, що дослідження виконувались у квазістаціонарному режимі. Як спектроскопічний елемент використовувалась мідь, яка потрапляла в розрядний проміжок у результаті ерозії електродів.

Реєструвались радіальні розподіли таких параметрів плазми дуги, як температура і електронна концентрація, що характеризують радіальну структуру розряду. Радіальний профіль температури визначався з відношення локальних інтенсивностей спектральних ліній CuI $\lambda = 510.5$ та 521.8 нм. Вимірювання штарківського розширення спектральної лінії CuI $\lambda = 515.3$ нм дозволили визначити радіальний розподіл електронної концентрації.

Одержані експериментально радіальні профілі температури та електронної концентрації дозволяють розрахувати у припущенні ЛТР компонентний склад усіх присутніх у плазмі частинок, а також вміст міді. Його величина у газовому середовищі не перевищувала 1-10 об.% [12,22,24].

За радіус стінки вибирався радіус світіння розряду.

Результати та їх обговорення

Розглянута модель дугового розряду описує так звану «довгу дугу», де тепловий потік відводиться на стінки [9,13,20]. Її протилежністю виступає «коротка дуга», в якій тепловий потік відводиться, головним чи-

ном, в електроді. В цьому випадку визначальними стають приелектродні процеси. Слід також зазначити, що дуга, в якій перенесення тепла випромінюванням незначне, буде описуватися єдиними кривими у змінних r/R , ER і I/R (див.[9,13]).

На рис.1 наведені розрахункові залежності електронної та газової температури в термічній (електродуговій) плазмі. Зауважимо, що відрив температур є одним з головних факторів, які визначають характер контракції розряду [9,13,14]. Із рис.1 видно, що значний відрив температур є характерним для термічної плазми газу з наявним ефектом Рамзауера (аргон). Зазначимо також, що наявність достатньо великої кількості міді у суміші робить різницю температур практично незалежною від виду буферного газу (атомарний аргон або молекулярний азот).

Іншим важливим фактором, що впливає на характер контракції, є величина теплопровідності та співвідношення між складовими теплопровідності плазми [9,13,14]. Зазначимо, що у молекулярному газі величина повної газової теплопровідності сильно збільшується за рахунок перенесення енергії дисоціації (рис.2), внаслідок чого посилюється стягування розряду.

На рис.3 представлені розрахункові залежності електронної температури від зведеного струму I/R , а також результати експериментальних вимірювань у мідній дузі. Із порівняння експериментальних та розрахункових результатів видно, що при режимах розряду, які відповідають густинам струму $j_0 < 1 \text{ кА/см}^2$, розбіжність результатів розрахунку з експериментальними даними не перевищує 30%. При більш високих густинах струму розрахункові значення опиняються завищеними, що пов'язано із нехтуванням ролі випромінювання як у процесах перенесення тепла, так і в іонізаційному балансі плазми.

Отримані результати дозволяють скласти наступну картину контракції дуги без випромінювання в газових сумішах (рис.4). Найбільш значна контракція дугового розряду реалізується в умовах, коли перенесення тепла відбувається шляхом газової теплопровідності, зокрема, коли домінує дисоціативна теплопровідність (у випадку молекулярного газу). Це відповідає режимам розряду з відносно низькими температурами електронів, а, отже, й слабкими струмами. При підвищенні струму і температури електронів збільшується область, що займає плазма. Причому в газі, для якого має місце ефект Рамзауера, це зростання є більш значним, ніж для газу без такого ефекту.

З наступним збільшенням струму розряд переходить у режим домінування електронної теплопровідності, і величина радіусу контракції стабілізується, причому електрони передають свою енергію головним чином у зіткненнях з нейтралами. В цьому випадку $r_0/R \approx \text{const}$, внаслідок чого $r_0 \propto R$.

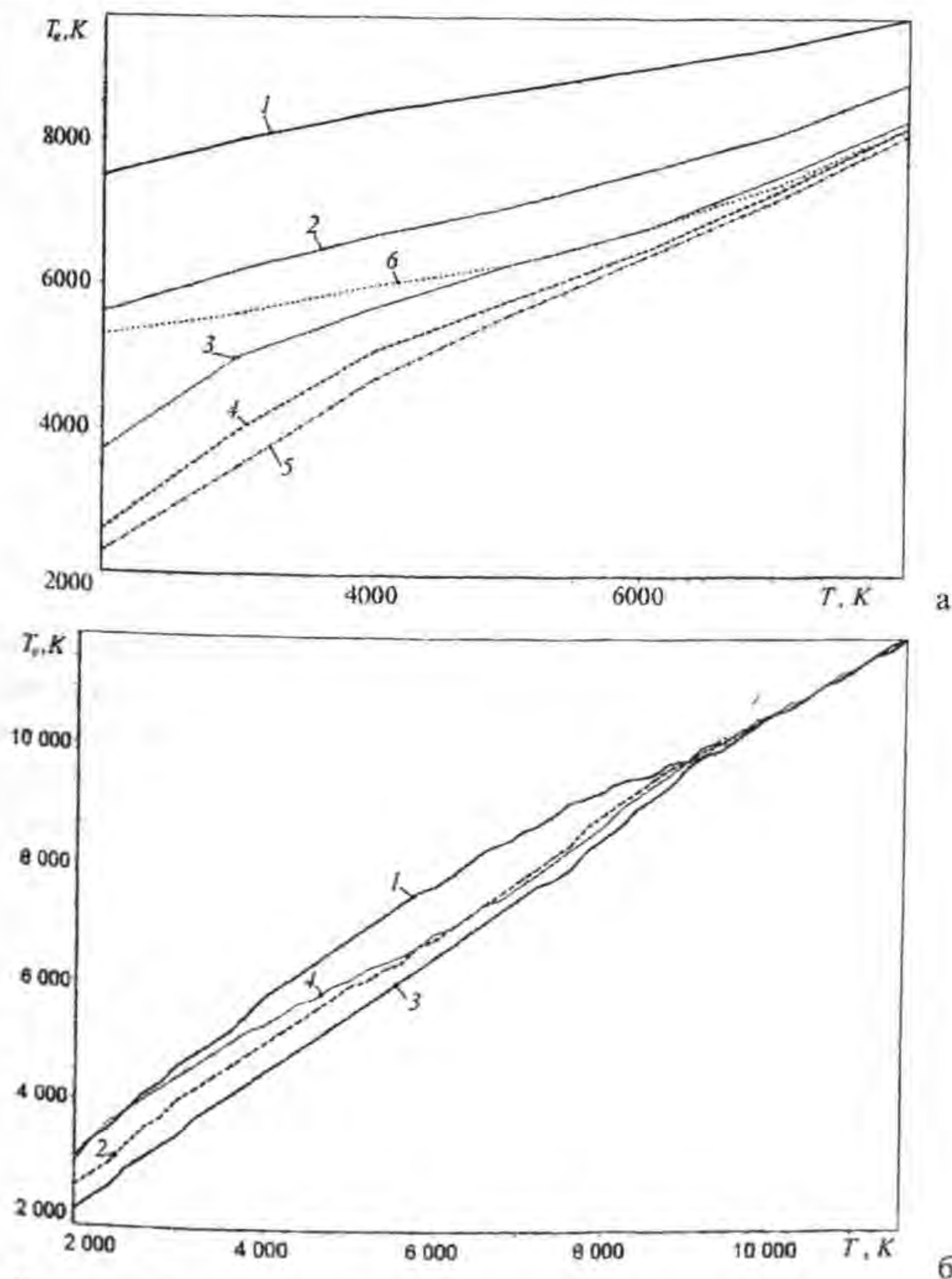


Рис.1. Електронна та газова температури в термічній плазмі атмосферного тиску ($E = 10$ В/см).
а) Крива 1 – Ar, 2 – Ar:Cu (99: 1 об. %) , 3 – Ar:Cu (95:5об.%), 4 – Ar:Cu (90: 10 об.%), 5 – Ar:Cu (85:15об.%), 6 –Ar:Cu(90:10об.%). Криві 2,3,4,5 розраховані з використанням резонансної моделі перерізу розсіяння електрона на атомі міді [12,13], а крива 6 – за нерезонансною моделлю[12,14].
б) 1– N_2 , 2 – N_2 :Cu (95:5 об.%), 3 – N_2 :Cu (90:10 об.%), 4 – N_2 :Cu (90:10 об.%). Криві 2,3 розраховані за резонансною моделлю, а крива 5 – за нерезонансною.

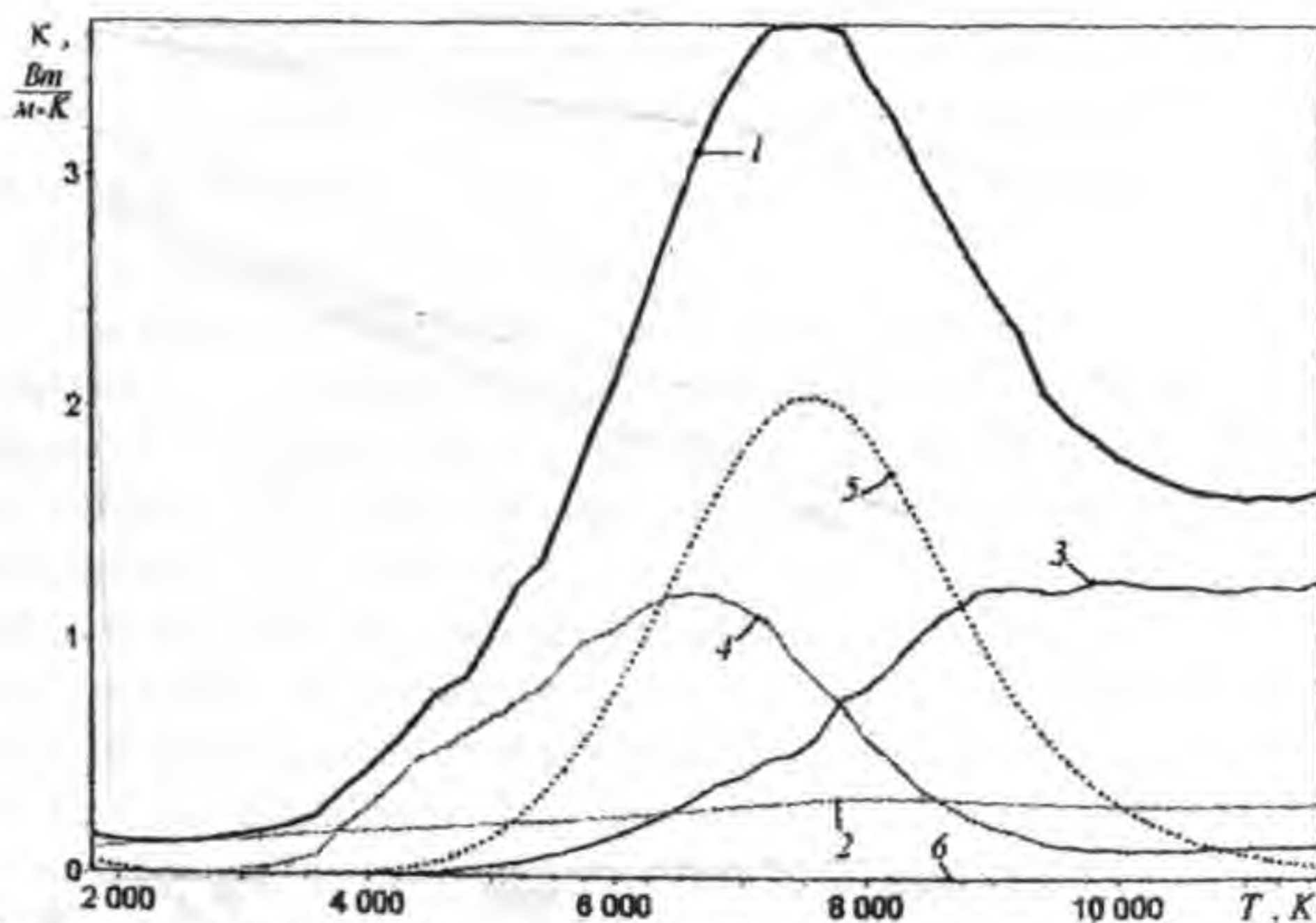


Рис.2. Повна теплопровідність та її складові для термічної плазми суміші $N_2:Cu$ (90:10 об.%) при атмосферному тиску ($E = 10$ В/см) в залежності від газової температури. Крива 1 – повна теплопровідність κ , 2 – газова теплопровідність κ_g , 3 – електронна теплопровідність κ_e , 4 – іонізаційна теплопровідність κ_{π} , 5 – дисоціативна теплопровідність $\kappa_{\pi d}$, 6 – іонна теплопровідність κ_i .

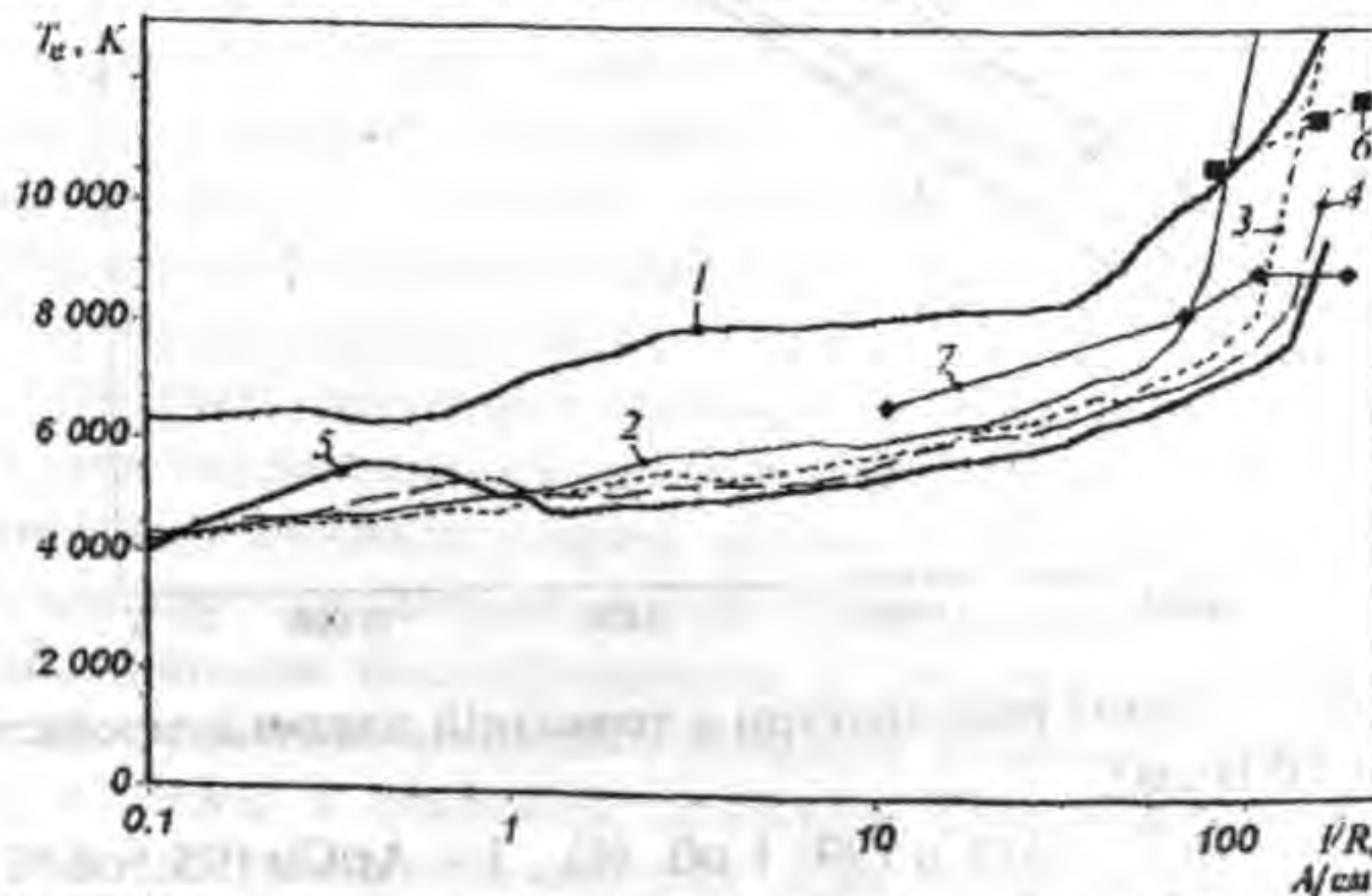


Рис.3. Залежність електронної температури в дузі атмосферного тиску від зведеного струму I/R . Розрахункові криві: 1 – N_2 , 2 – $N_2:Cu$ (99:1 об.%), 3 – $N_2:Cu$ (97:3 об.%), 4 – $N_2:Cu$ (95:5 об.%), 5 – $N_2:Cu$ (90:10 об.%). Криві для сумішей із вмістом міді розраховані згідно резонансної моделі перерізу. Експериментальні криві: 6 – дуга в азоті [26], 7 – відкрита дуга з плавкими мідними електродами в повітрі (дана робота).

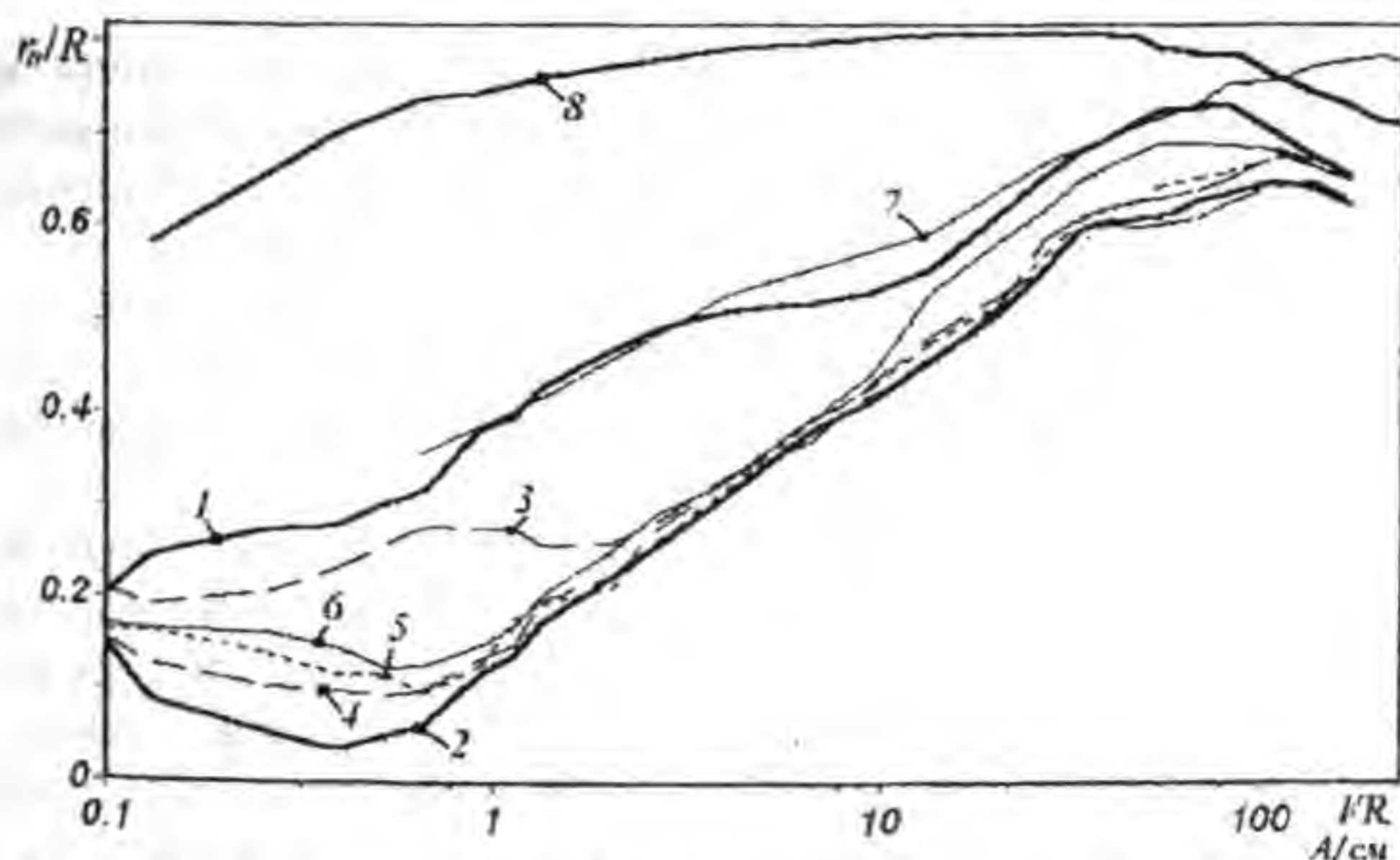


Рис.4. Залежність зведеного радіуса контракції дуги r_0/R від зведеного струму I/R . Розрахункові криві: 1 – N_2 , 2,3 – $N_2:Cu$ (90:10 об.%), 4 – $N_2:Cu$ (95:5 об.%), 5 – $N_2:Cu$ (97:3 об.%), 6 – $N_2:Cu$ (99:1 об.%), 7 – Ne, 8 – Ar. Криві для сумішей, що містять мідь, розраховані згідно резонансної моделі перерізу, за виключенням кривої 3 (нерезонансна модель).

Подальше збільшення струму дуги викликає підвищення температури електронів, і ступінь іонізації газового середовища збільшується. Посилюється вплив зіткнень електронів з іонами, внаслідок чого розміри розрядної області для стабілізованої дуги починають зменшуватися. При ще більшому струмі розміри розрядної області стабілізуються.

Однак, необхідно мати на увазі те, що при розгляді контракції дуги з домінуючими електрон-іонними зіткненнями слід враховувати вплив променевих процесів як на теплоперенесення, так і на іонізаційні процеси у плазмі. Вплив випромінювання може суттєво змінити вигляд кривих на рис.4.

Зазначимо, що вплив ефекту Рамзауера на контракцію розряду може бути нейтралізований. Так, додавання до аргону міді істотно посилює стягування дуги. Крім того, наявність міді в газовій суміші (за умови наявності резонансу форми) призводить до сильного стягування розряду при слабких струмах (рис.4).

Слід також зауважити, що у молекулярному газі характер теплової контракції буде визначатися значною мірою дисоціативною теплопровідністю (рис.2,4). При цьому режим домінування електронної теплопровідності практично не реалізується. Зазначимо також те, що, згідно рис.4, контракція дуги в молекулярному газі (азоті) подібна контракції дуги в інертному газі з достатньо високою газовою теплопровідністю (неон). Це узгоджується з тим фактом, що вольт-амперні характеристики дуг в азоті та неоні також близькі [27].

Висновки

Контракція дугового розряду в мідній парі істотним чином залежить від вмісту міді у газовій суміші. Зміна цього вмісту суттєво впливає на теплофізичні характеристики суміші і характеристики електрон-атомних зіткнень, якими визначаються електрофізичні параметри дуги.

Стягування дугового розряду найбільш сильне, коли в процесі відведення тепла домінує газова теплопровідність. У молекулярному газі характер теплової контракції буде визначатися значною мірою дисоціативною теплопровідністю.

Наявність ефекту Рамзауера для газу, в якому горить дуга, суттєво впливає на характер контракції, що виявляється у послабленні стягування дугового розряду для відповідного діапазону температур. Однак, наявність пари міді у газовому середовищі нейтралізує вказаний вплив. Дуговий розряд у такому газовому середовищі може бути значно сильніше стягнутий, ніж у чистих газах.

Наявність ефекту резонансу форми для розсіяння електронів на атомах газового середовища призводить до посилення контракції дуги при слабких струмах.

За наявності в газовому середовищі достатньо великої кількості пари міді характер теплової контракції практично не залежить від типу буферного газу.

Література

1. Елецкий А.В., Рахимов А.Т. Неустойчивости в плазме газового разряда // Химия плазмы. – М.: Атомиздат, 1977. – Вып. 4. – С. 123 - 167.
2. Eletsii A.V., Smirnov B.M. Nonuniform gas discharge plasma // Physics – Uspekhi.-1996.-Vol.39, No.11.-P.1137-1156.
3. Смирнов Б.М. Сжатие положительного столба дуги высокого давления // Теплофизика выс. температур.-1997.-Т.35, №1.-С.14-18.
4. Елецкий А.В., Палкина Л.А., Смирнов Б.М. Явления переноса в слабоионизованной плазме.- М.: Атомиздат, 1975. – 336 с.
5. Патон Б.Е., Замков В.Н., Прилуцкий В.П., Порицкий П.В. Контракция дуги флюсом при сварке вольфрамовым электродом в аргоне // Автомат. сварка.- 2000. - №1 - С. 3 –9.
6. Scheibner K.F., Hazi A.U., Henry R.J. Electron-impact excitation cross-sections for transitions in atomic copper // Phys.Rev.A. –1987.-Vol.35, No.11.-P.4869-4872.
7. Chervy B., Dupont O., Gleizes A., Krenek P. The influence of the cross-section of the electron-copper atom collision on the electrical conductivity of Ar-Cu and SF₆-Cu plasmas // J.Phys.D:Appl.Phys. – 1995. - Vol.28., No.10. - P.2060-2066.
8. Gressault Y., Gleizes A. Thermodynamic properties and transport coefficients in Ar-H₂-Cu plasmas // J.Phys.D:Appl.Phys. – 2004. - Vol.37., No.2. - P.560-572.
9. Порицкий П.В. Механізми контракції дугового розряду 2.Особливості контракції дуги малого струму в суміші інертного газу з міддю // Укр.фіз.журн.-2005.-Т.50,№9.-С.931-938.

10. Rahal A.M., Rahhaoui B., Vacquie S. Copper vapour diffusion in a nitrogen arc chamber // J.Phys.D: Appl.Phys. - 1984.- Vol.17, No.9.- P.1807-1822.
11. Ouajji H., Cheminat B., Andanson P. Composition and conductivity of a copper-air plasma // J.Phys.D: Appl.Phys. - 1986.- Vol.19, No.10.- P.1903-1916.
12. Babich I.L., Veklich A.N., Zhovtyansky V.A. Electric arc plasma in copper vapour // Укр.фіз.журн.-1999.-Т.44, №8.-С.963-968.
13. Порицький П.В. Механізми контракції дугового розряду I. Особливості теплової контракції // Укр. фіз. журн.-2004.-Т.49, №9.-С.884-891.
14. Замков В.М., Порицький П.В., Прилуцький В.П. Про контракцію зварювальної дуги в сумішах інертних газів // Доповіді НАН України.-2005.-№7.-С.77-82.
15. Хаксли Л., Кромптон Р. Диффузия и дрейф электронов в газах: Пер. с англ. -М.: Мир, 1977.-672 с.
16. Phelps A.V. Pitchford L.C. Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport // Phys.Rev.A.-1985.-Vol.31, No.5.-pp.2932-2949.
17. Brokaw R.S. Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium II // J.Chem.Phys.-1960.-Vol.32.-pp.1005-1006.
18. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах: Пер. с англ. -М.: Мир, 1976.-556с.
19. Рид Р., Праусниц Дж., Шервуд Т. Свойства газов и жидкостей.: Пер. с англ.-Л.:Химия, 1982.-592с.
20. Жовтянський В.А., Патріюк В.М. Особливості тепловідведення від електричної дуги в парах міді // Укр.фіз.журн.-2000.-Т.45, №9.-С.1059-1066.
21. Батенин В.М., Минаев П.В. О температуре на оси электрической дуги в аргоне // Теплофизика выс. температур.-1969.-Т.7, №2.-С.208-212.
22. И.Л.Бабич, А.Н.Веклич, В.А.Жовтянский, А.И. Чередарчук, Физические особенности и диагностика плазмы свободногорящей электрической дуги в парах меди // Инж.-физ. журнал. - 1998. - Т.71, №1. - С.131 - 138.
23. Веклич А.Н., Жовтянский В.А. Скоростной томографический спектрометр // Журн. приклад. спектроскопии. - 1989. - Т.50, №4. - С.565 - 570.
24. Бабич И.Л., Веклич А.Н., Жовтянский В.А. Исследование роли самопоглощения излучения в свободногорящих дугах в парах меди методом лазерной диагностики // Журн. приклад. спектроскопии. - 1989. - Т.51, №4. - С.571 - 575.
25. Веклич А.М., Бабич І.Л., Чередарчук А.І. Спектроскопічні дослідження електродугової плазми складної суміші газу та парів металів //Вісник Київського ун-ту ім. Тараса Шевченка. Сер. Радіофізика та електроніка.-2000.-вип.2.-С.25-29.
26. Асиновский Э.И., Кириллин А.В., Низовский В.Л. Стабилизированные электрические дуги и их применение в теплофизическом эксперименте.-М.: Наука, 1992.-264с.
27. Жуков М.Ф., Коротеев А.С., Урюков Б.А. Прикладная динамика термической плазмы.-Новосибирск: Наука (Сибирск.отд.), 1975. - 298с.

Надійшла до редакції 15.03.2006

УДК 519.9

Володимир І. Висоцький, Сергій В. Сімонов*

Volodymyr I. Vysotskii, Sergiy V. Simonov*

Нові можливості керування рухом атомів (молекул) та діелектричних наночастинок за допомогою інтенсивних недифрагуючих оптичних пучків

New possibilities for manipulation of motion of atoms (molecules) and dielectric nanoparticles by intense nondiffracting optical beams

Представлені результати комп'ютерного моделювання дифракції Бесселевих світлових пучків та їх комбінацій. Запропоновано метод створення 3D-пасток довільної конфігурації для дипольних та діелектричних частинок.

Ключові слова: бездифракційні пучки, оптичні твізери.

The results of Bessel light beams and their combinations propagation computer modeling are presented. The method for dipole and dielectric particles 3D-traps of arbitrary configuration creation is offered.

Key Words: nondiffracting beams, optical tweezers.

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

Вступ

З часу теоретичного передбачення та експериментального доведення існування бездифракційних світлових пучків [1] створено багато схем з їх використанням. Бесселеві бездифракційні пучки характеризуються суттєво меншою, порівняно з Гаусовими пучками, дифракційною розбіжністю центрального піку інтенсивності та значно кращою стійкістю до збурень. Вони розглядаються як перспективний інструмент для створення надточних неінвазивних інструментів – оптичних твізерів (оптичних пінцетів) – для маніпулювання за допомогою інтенсивних неоднорідних світлових пучків рухом різноманітних частинок – діелектричних кульок у колоїдних розчинах [2], чи атомів у конденсаті Бозе-Ейнштейна [3] тощо. Досі запропоновані і реалізовані схеми оптичних твізерів дозволяли здійснювати ефективне маніпулювання рухом частинок лише по двох (з трьох можливих) координатах, по яких можна було задавати і контролювати розподіл інтенсивності світлового поля.

Актуальність даної роботи визначає те, що застосований в ній метод дозволяє конструювати оптичні твізери з використанням бездифракційних пучків і з довільним (наперед визначеним) 3D-розподілом інтенсивності світлового поля. Цей розподіл може бути у вигляді одиничного піку (який при певних умовах може бути 3D-пасткою для диполів чи діелектричних частинок) або у вигляді їх періодичної послідовності, що дозволило б здійснювати узгоджене керування ансамблем таких частинок.

1. Моделювання процесу поширення Бесселевих пучків 1-го та 2-го порядків

Оскільки фізично неможливо створити світловий пучок нескінченної апертури, то і ідеальні, повністю бездифракційні поля, отримати неможливо. Однак, оскільки, навіть, пучки скінченної апертури демонструють бездифракційні властивості приосової області, то це не є перешкодою до створення "квазібездифракційних пучків" з аномально малою кутовою розбіжністю. Для того, щоб дослідити бездифракційні властивості світлових пучків скінченної апертури, нами було проведено чисельне моделювання процесу їх поширення. Далі буде обґрунтовано, що для керування рухом частинок найефективнішими є бездифракційні світлові пучки, радіальні розподіли амплітуди яких описуються функціями Бесселя нульового та першого порядків – $J_0(\alpha \cdot r)$ та $J_1(\alpha \cdot r)$, де α – поперечне хвильове число.

Чисельне моделювання проводилось у рамках скалярної теорії дифракції. В квазіоптичному наближенні дифракційні явища добре описує параболічне рівняння для скалярної амплітуди поля [4]:

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} + i \frac{1}{2k_0} \Delta_{\perp} \psi = 0 \quad (1)$$

Його розв'язок має вигляд:

$$\psi(\vec{r}, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(\vec{r}_1) H(\vec{r} - \vec{r}_1) d^2 r_1, \quad (2)$$

де

$$H(\vec{r} - \vec{r}_1) = \frac{ik_0}{2\pi z} \exp\left[-\frac{ik_0}{2z} (\vec{r} - \vec{r}_1)^2\right] \quad (3)$$

– функція Гріна параболічного рівняння (1).

Розглянемо випадок, коли початковий розподіл амплітуди Бесселевого пучка має вигляд $\psi_0(r, \varphi, z=0) = A_0 J_m(\alpha r) e^{im\varphi}$.

У циліндричній системі координат загальний розв'язок (2) приймає вид:

$$\psi(r, z) = \exp\left(ikz + \frac{ikr^2}{2z}\right) \frac{k}{iz} \int_0^{r_0} r_1 J_m(\alpha r_1) \exp\left(\frac{ikr_1^2}{2z}\right) J_m(krr_1/z) dr_1 \quad (4)$$

На рис. 1, 2 зображена зміна розподілу інтенсивності центральної частини Бесселевого пучка нульового порядку при його поширенні вздовж осі z у вільному просторі. Видно, що, центральна область пучка скінченної апертури в межах інтервалу $z < Z_{\max} \approx kr_0 / \alpha$ практично не дифрагує. При цьому величина максимальної відстані бездифракційного режиму поширення пучка $Z_{\max}$ на декілька порядків більша, ніж параметр Релея $l \approx 1/\alpha^2 \lambda$ для центрального піку інтенсивності радіусом $r_0 \approx 1/\alpha$.

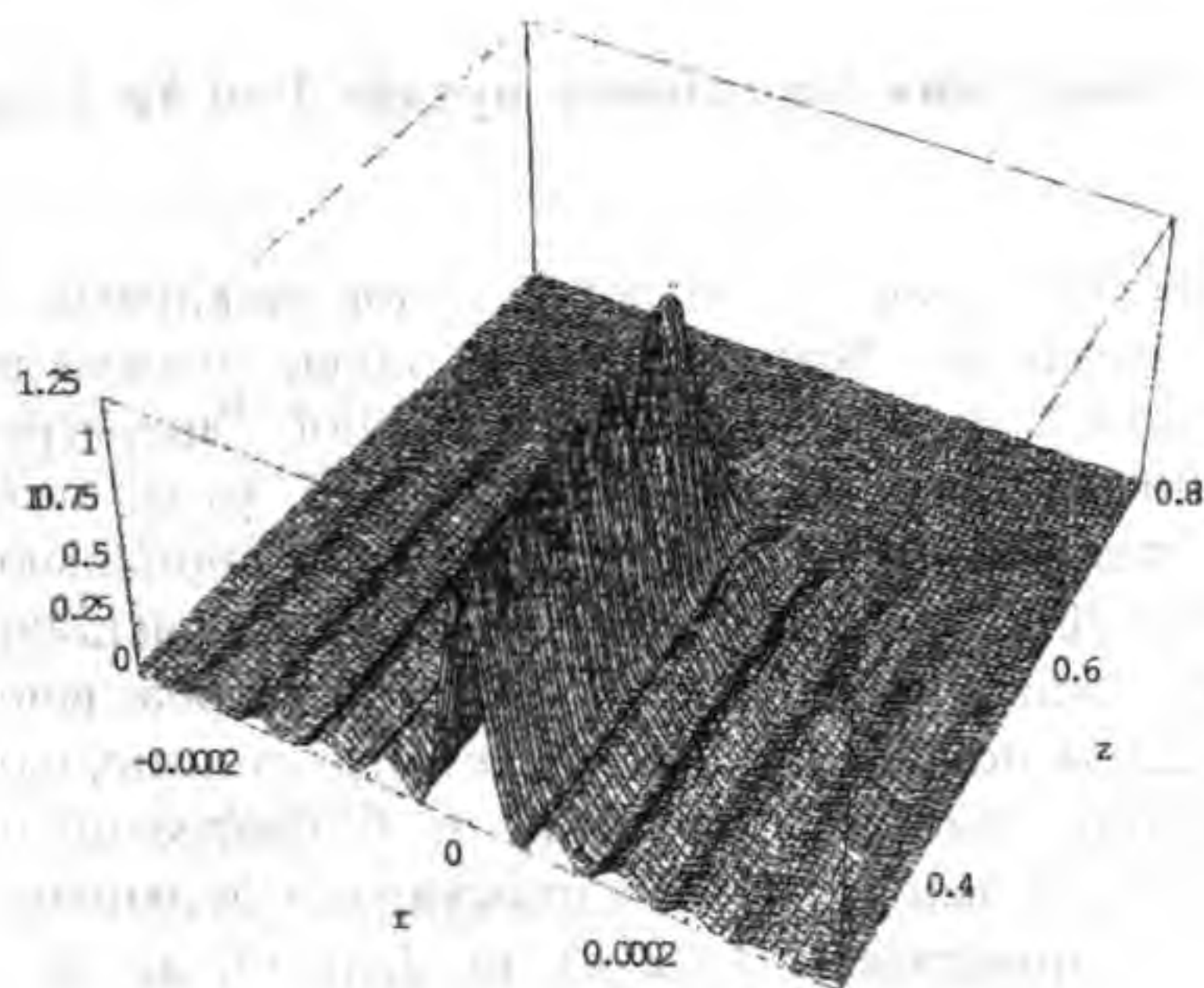


Рис. 1. Зміна розподілу інтенсивності в приосьовій частині Бесселевого пучка нульового порядку.

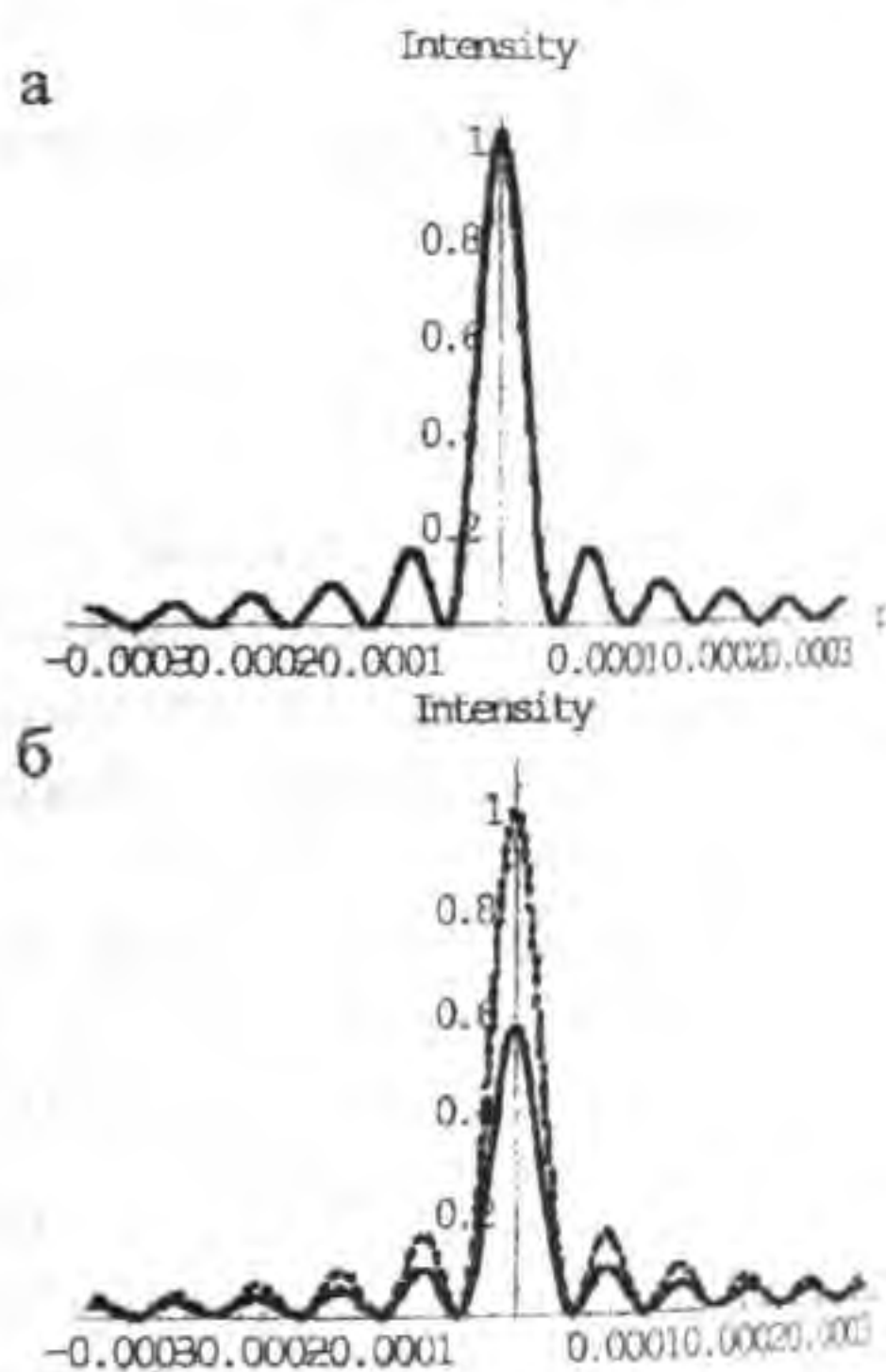


Рис. 2. Розподіл інтенсивності $I(r)$ Бесселевого пучка нульового порядку при $z = 40$ см (а) та $z = 60$ см (б).

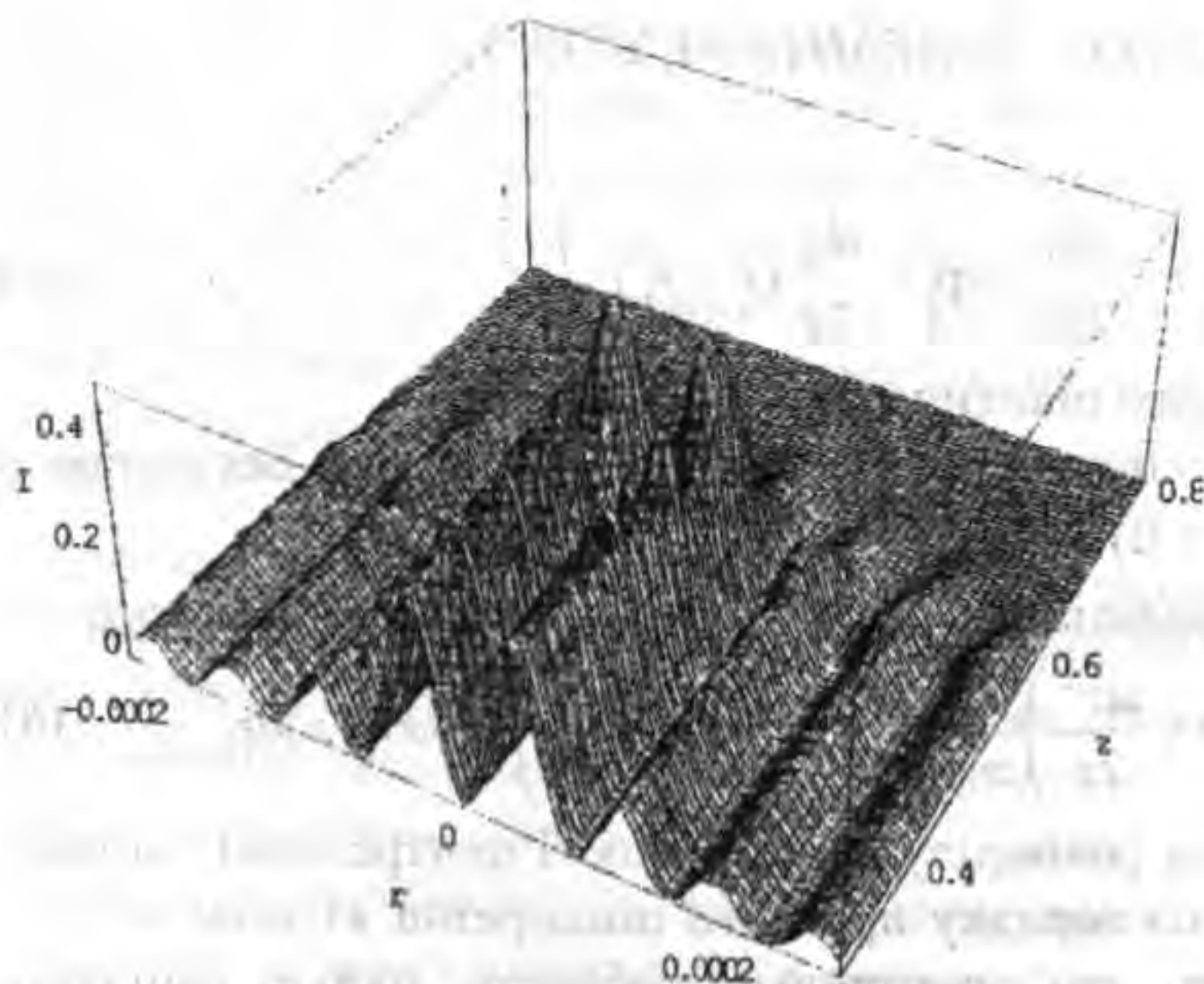


Рис. 3. Зміна розподілу інтенсивності в приосьовій частині Бесселевого пучка першого порядку.

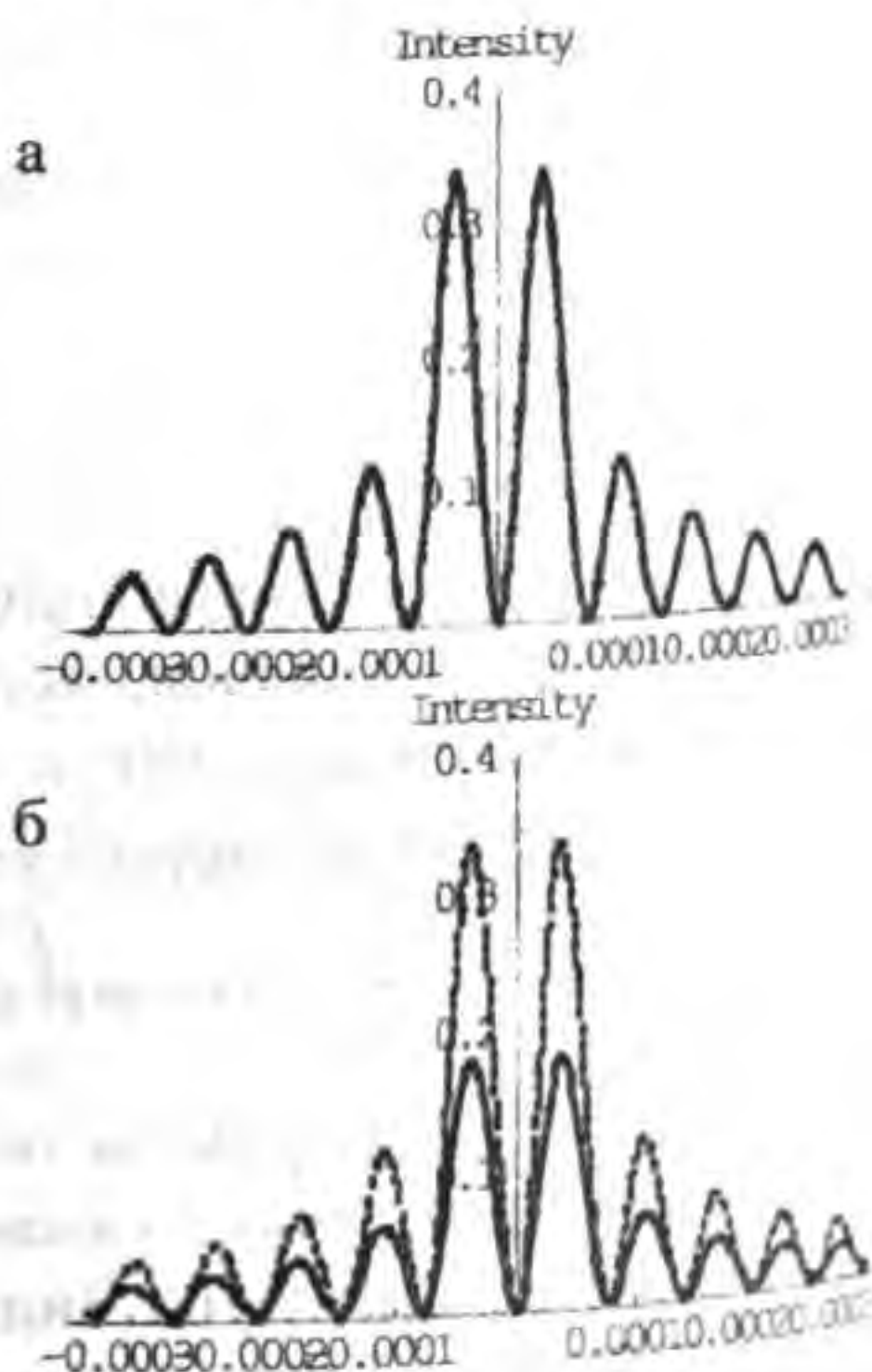


Рис. 4. Розподіл інтенсивності $I(r)$ Бесселевого пучка першого порядку при $z = 40$ см (а) та $z = 60$ см (б).

Як видно з рис. 3, 4, аналогічні бездифракційні властивості центральної частини демонструє і пучок, що відповідає функції Бесселя першого порядку.

2. Синтез довільних 3D-розподілів бездифракційних світлових полів

Бездифракційні властивості Бесселевих пучків дають можливість застосовувати їх для керування рухом частинок, проте для цього потрібно синтезувати світлові поля, які б мали тривимірний наперед заданий розподіл інтенсивності. Оскільки набір функцій Бесселя є повним, то з їх допомогою це можна здійснити [5]. Отже, нам потрібно синтезувати світлове поле з заданим розподілом інтенсивності за радіальною координатою і вздовж осі поширення. Амплітуду цього поля запишемо як:

$$\psi(r, z, t) = e^{-i\omega_0 t} \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n J_0(\alpha_n \cdot r) \cdot e^{i\beta_n z}, \quad (5)$$

де n - цілі числа, а A_n - сталі коефіцієнти.

При цьому, оскільки (5) є розв'язком скалярного рівняння Гельмгольца, то для кожного n параметри $\omega_0, \alpha_n, \beta_n$ повинні задовольняти умові:

$$\alpha_n^2 + \beta_n^2 = \frac{\omega_0^2}{c^2}. \quad (6)$$

Якщо ми хочемо синтезувати поле, амплітуда якого на осі протягом скінченної відстані $0 \leq z \leq L$ змінюється за заданим законом $F(z)$:

$$F(z) \approx \psi(0, z) = e^{iQz} \sum_{n=-N}^N A_n e^{i\frac{2\pi}{L}nz}, \quad (7)$$

де $Q + 2\pi n / L = \beta_n$ - повздовжні хвильові числа пучків-компонент, N - їх кількість, то коефіцієнти A_n можна знайти з оберненого перетворення Фур'є:

$$A_n = \frac{1}{L} \int_0^L F(z) e^{-i\frac{2\pi}{L}nz} dz. \quad (8)$$

Задаючи потрібний нам розподіл поля $F(z)$ і знаходячи відповідні коефіцієнти, ми можемо синтезувати із заданою точністю (яка залежить від кількості доданків ряду N) практично довільне поле. На рис. 5 ми бачимо, що достатня точність відтворення функції $F(z) = \exp(-[(z - L/2)/a]^2)$ досягається вже при $N=10$. На рис. 6 зображено 3D-розподіл інтенсивності пучка з цим заданим наперед Гаусовим розподілом.

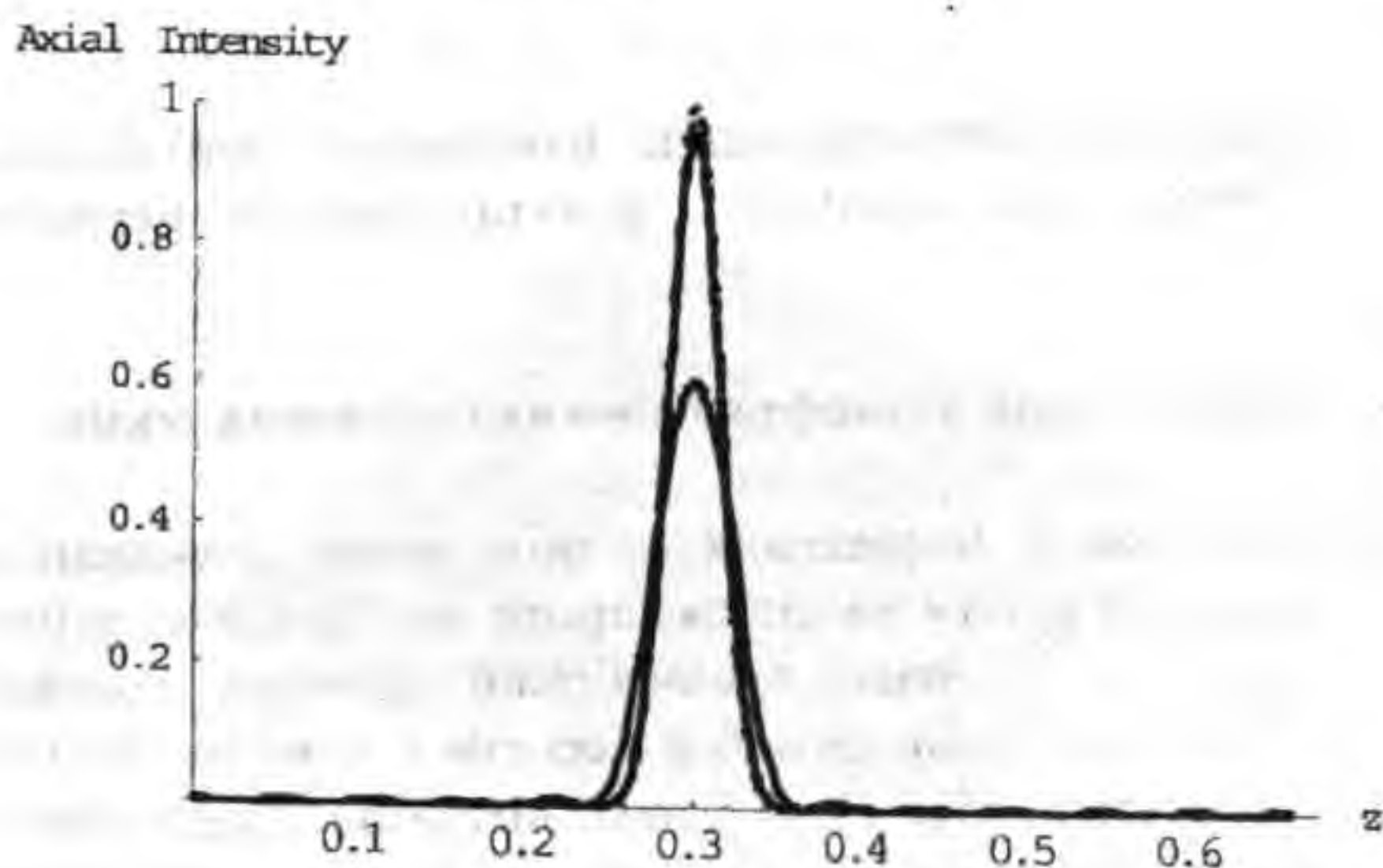


Рис. 5. Аксиальний розподіл амплітуди: теоретичний ($a = L/20$), і синтезований із $N = 5$ та $N = 10$ функцій Бесселя.

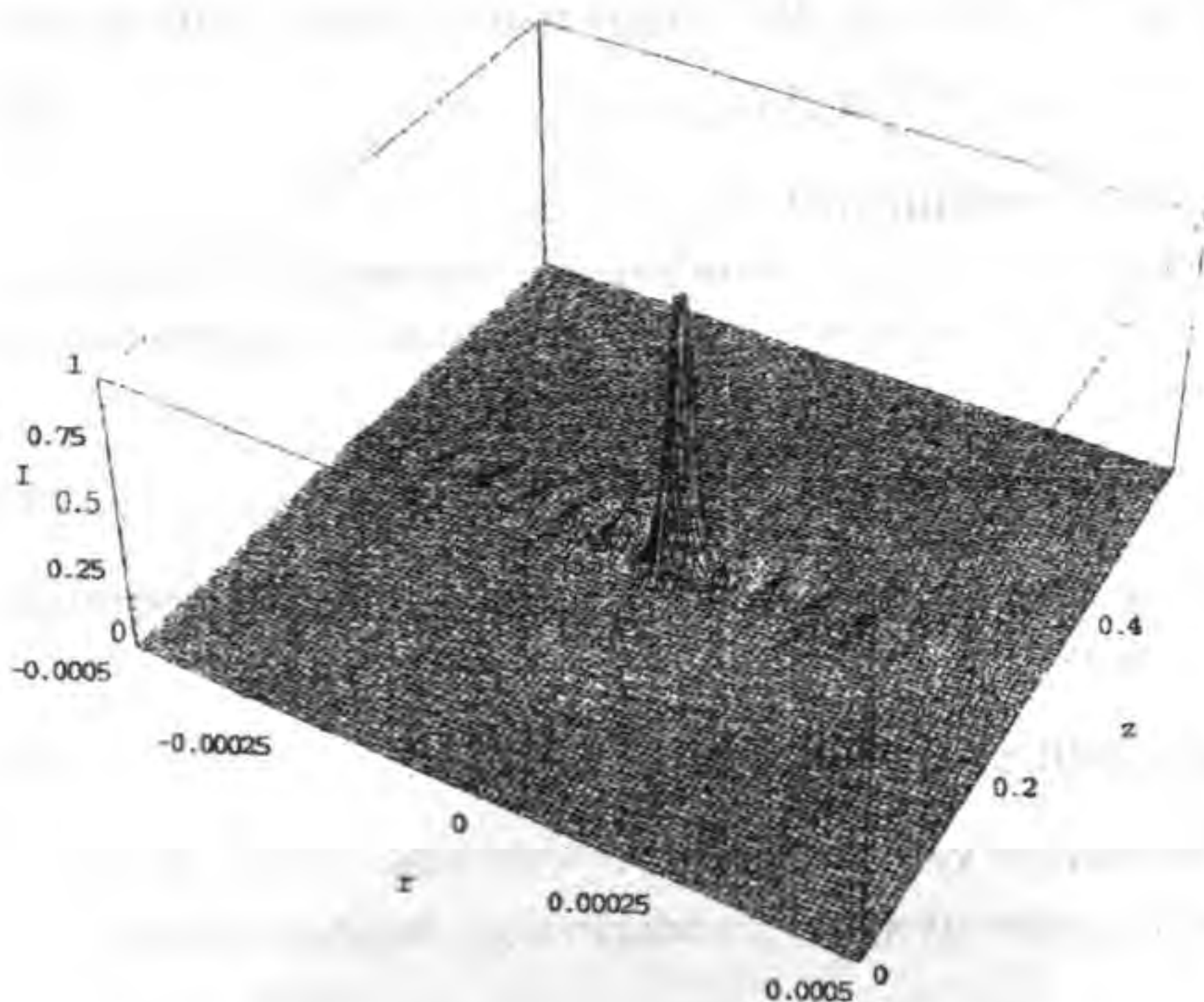


Рис. 6. Сумарний розподіл інтенсивності $I(r, z)$ синтезованого пучка, $N = 30$, $L = 60$ см, $Q = 0,9999 \cdot k_0$.

Таким чином, ми можемо вибрати довільний розподіл $F(z)$. Наприклад, для одночасного маніпулювання ансамблем частинок чи угруповання їх у певні періодичні послідовності можна задавати і синтезувати періодичні функції. Для прикладу ми поставили завдання синтезувати світлове поле, повздовжній розподіл амплітуди якого описувався б функцією $F(z) = 1 - |\cos(k \cdot z)|$. На рис. 7 зображено теоретичний розподіл амплітуди на осі пучка, який ми хотіли б отримати, а на рис. 8 – 3D-розподіл інтенсивності синтезованого із $N = 30$ складових поля.

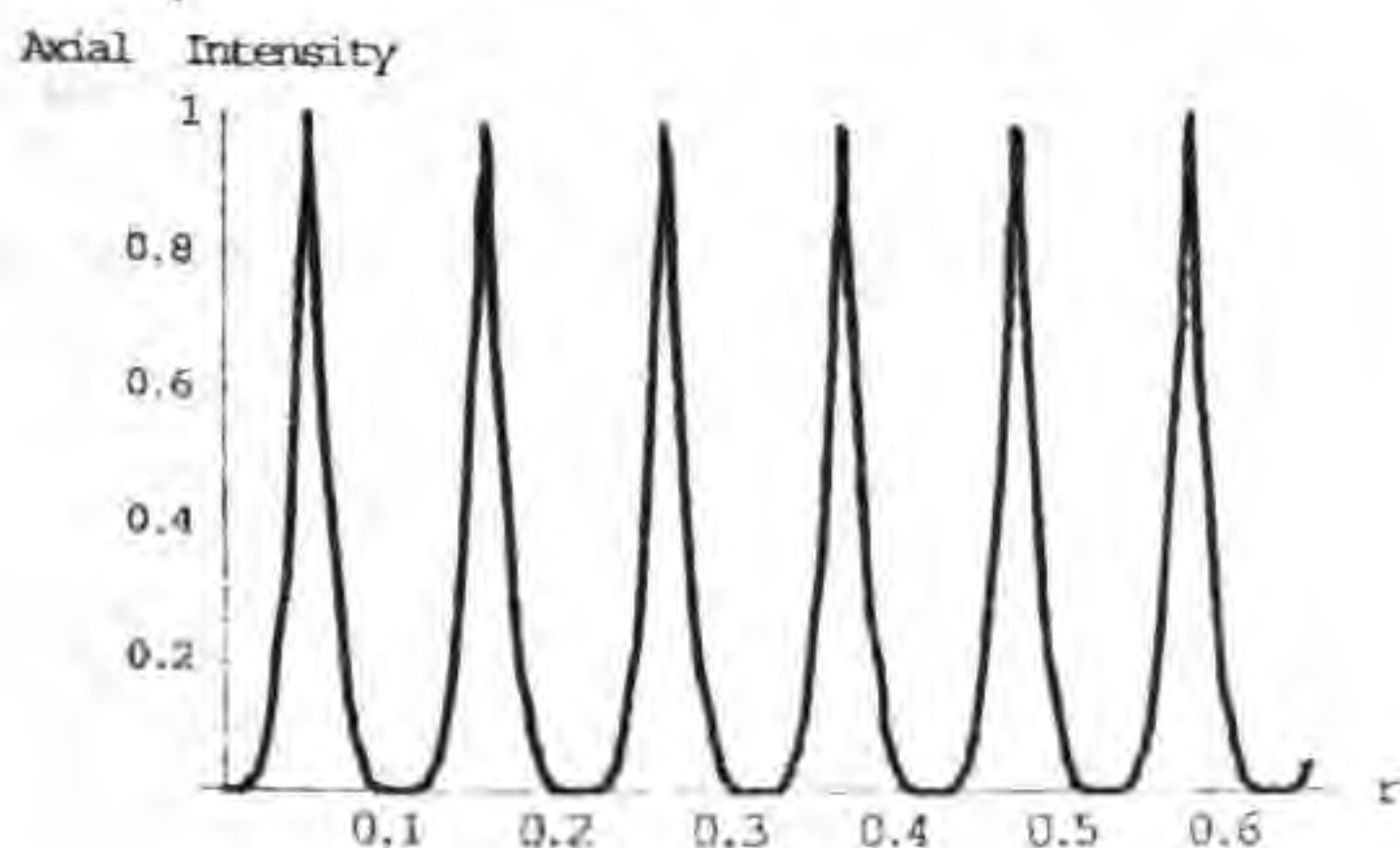


Рис. 7. Теоретичний розподіл амплітуди на осі.

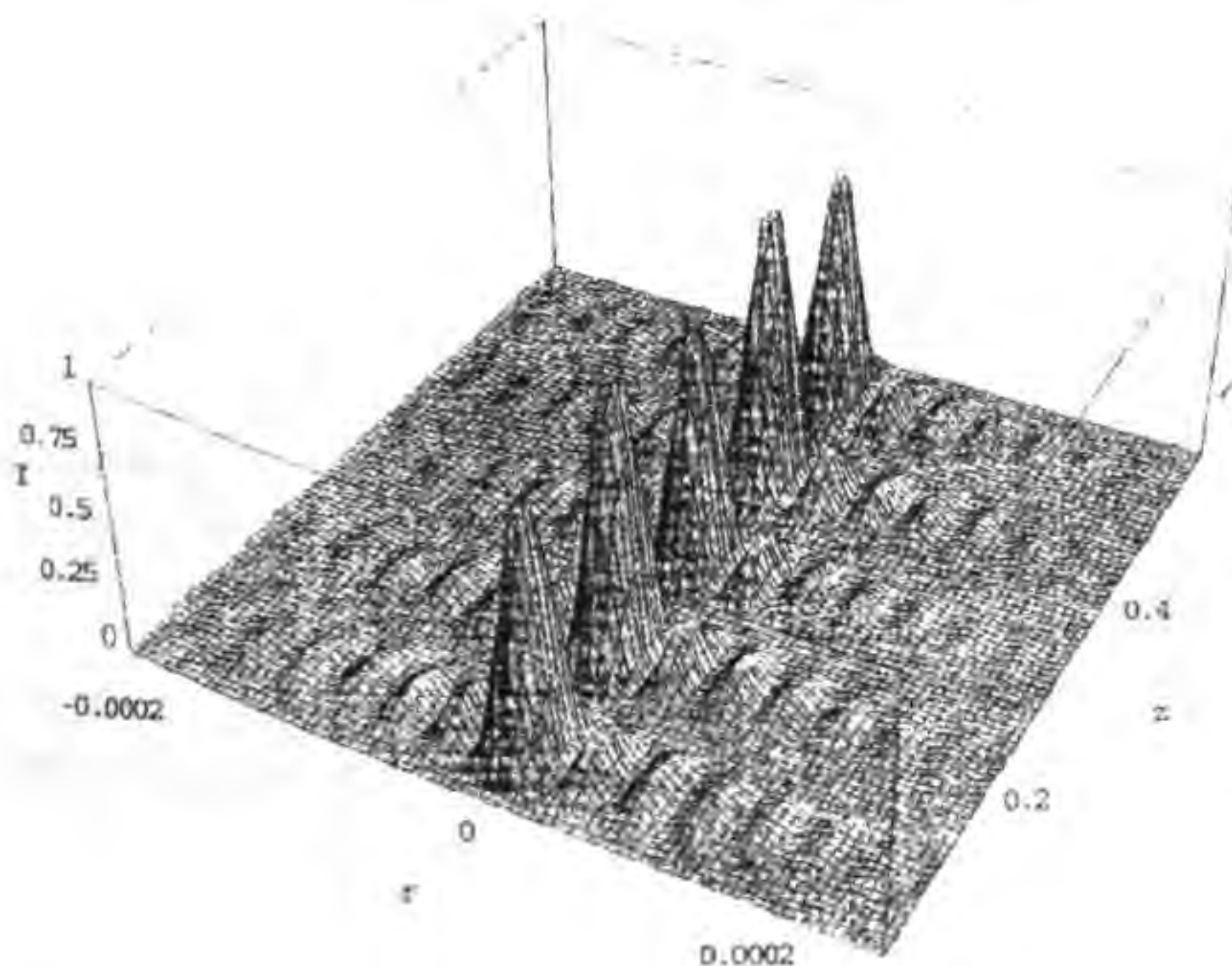


Рис. 8. Сумарний розподіл інтенсивності $I(r, z)$ синтезованого пучка, $N = 30$, $L = 60$ см, $Q = 0,9999 \cdot k_0$.

3. Маніпулювання рухом частинок

Далі розглянемо, яким чином взаємодіють з довільними та синтезованими світловими полями частинки різної природи: власні диполі, наведені диполі та діелектричні кульки, які знаходяться в різноманітних середовищах.

3.1. Власні диполі.

Розглянемо частинки, що мають власний постійний електричний дипольний момент. Їх можна представити як два точкових різнойменних заряди однакової величини q , жорстко зв'язаних відповідним вектором $\Delta \vec{r}$. У силу малого розміру атомарного (молекулярного) диполя можна

вважати, що маса частинки зосереджена в центрі мас системи зарядів, тобто посередині між ними.

Записавши функцію Лагранжа такої системи в електромагнітному полі:

$$L = \frac{mv^2}{2} - \frac{q}{c} (\vec{A}(\vec{r} + \Delta\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r})) \cdot \vec{v} \quad (9)$$

і взявши похідну по швидкості, ми отримаємо відповідний узагальнений імпульс власного диполя в полі із змінним вектор-потенціалом $\vec{A}$:

$$\vec{P} = \vec{p} - \frac{q}{c} (\vec{A}(\vec{r}_0 + \Delta\vec{r}) - \vec{A}(\vec{r}_0)) = \vec{p} - \frac{\vec{d}}{c} \nabla \vec{A}, \quad (10)$$

де $\vec{d} = q\Delta\vec{r}$. В результаті вираз для енергії системи матиме вигляд:

$$W(\vec{r}) = \frac{\vec{P}^2}{2m} = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{\vec{p} \cdot \vec{d}}{mc} \nabla \vec{A} + \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{d}}{c} \right)^2 (\nabla \vec{A})^2 \quad (11)$$

У формулі (11) процес взаємодії частинки з полем характеризується двома останніми доданками, які залежать від вектор-потенціалу поля $\vec{A}$.

Перший з цих доданків пропорційний похідній від $\vec{A}$ і, внаслідок цього, є знакозмінною періодичною величиною. З (11) видно, що при усередненні за періодом лазерної хвилі цей доданок не дає вкладу у вираз для середньої енергії диполя.

Другий доданок є додатною осцилюючою функцією часу і тому, при усередненні, не зникає, а призводить до виразу для характерної енергії пондеромоторної взаємодії:

$$V_{pond}(\vec{r}) = \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{d}}{c} \right)^2 \langle (\nabla \vec{A})^2 \rangle. \quad (12)$$

Очевидні умови застосування такого усереднення. Воно має сенс у тому випадку, коли лазерне поле діє на масивні частинки, які за один період лазерного поля не можуть істотно зрушитись з місця. Атоми та молекули в повній мірі відповідають цій умові.

З виразу (12) слідує, що енергія пондеромоторної взаємодії, будучи формально отриманою з виразу для кінетичної енергії, має всі властивості потенціальної енергії. Враховуючи особливості просторового розподілу будь-якого модульованого в просторі лазерного пучка, очевидно, що дно потенціальної ями, яка відповідає (12), співпадає з екстремумом амплітуди лазерного пучка (в цій області $\langle (\nabla \vec{A})^2 \rangle = 0$). В той же час вершини потенціальної ями відповідають області максимуму величини $\langle (\nabla \vec{A})^2 \rangle$.

Із (12) слідує, що такі частинки будуть втягуватись в область з більшою інтенсивністю. Зокрема, пучки, зображені на рис. 6, 8, будуть створювати для цих частинок 3D-пастки, що дає змогу маніпулювати їх рухом.

3.2. Наведені диполі.

Поява наведеного дипольного моменту пов'язана з деформацією відповідних електронних оболонок атомів або молекул. Процес формування таких диполів та аналіз особливостей їх взаємодії з періодичними структурами детально розглядався в роботі [6]. Інший аналог випливає з проблеми створення оптичних пасток та атомних хвилеводів для атомів конденсату Бозе-Ейнштейна (КБЕ), які є класичним прикладом наведених диполів. У роботі [3] наводиться вираз оптичного дипольного потенціалу зовнішнього поля:

$$V(r, z) = \frac{\hbar \Gamma^2}{8(\omega_0 - \omega_a)} \frac{I(r, z)}{I_{\text{sat}}}, \quad (13)$$

де Γ - природна ширина лінії оптичного переходу, ω_a - частота оптичного переходу, I_{sat} - резонансна інтенсивність насичення. Таким чином, якщо лазерна частота $\omega_0 < \omega_a$ (red detuned laser), то потенціал є від'ємним, і атоми втягуються в область з більшою інтенсивністю. Для цього випадку працює все, сказане вище для власних диполів. Якщо ж виконується протилежна умова $\omega_0 > \omega_a$ (blue detuned laser), то фокусуючими для атомів КБЕ є Бесселеві пучки вищих порядків за нулевий. При цьому пучок першого порядку (Рис. 3) є найбільш ефективним для фокусування та каналювання атомів, оскільки має найбільшу крутизну потенціалу біля осі пучка. Відзначимо, що формула (13) справедлива лише поза межами резонансу (при $|\omega_0 - \omega_a| \gg \Gamma$). Більш загальна формула наведена в роботі [6].

3.3. Діелектричні частинки в колоїдних розчинах.

Найбільш поширеним застосуванням оптичних твізерів є керування рухом частинок в колоїдних розчинах. При аналізі такого процесу можна вважати частинку діелектричною кулькою з показником заломлення n_p та радіусом R , для якої виконується умова наближення Мі ($R \geq \lambda$), де λ - довжина світлової хвилі [2]. В цьому наближенні можна в явному вигляді виразити дві складові сили, що діятимуть на частинку. Перша - вздовж напрямку поширення світлового пучка:

$$F_{\text{scat}} = \frac{158 \cdot \pi^5 R^6}{3\lambda^4} \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) \cdot \frac{n_m}{c} I_0, \quad (14)$$

де $m = n_p / n_m$, n_m - показник заломлення середовища, I_0 - інтенсивність випромінювання.

Друга – градієнтна або пондеромоторна – спрямована в напрямку найбільшого зростання похідної функції інтенсивності пучка:

$$\vec{F}_{grad} = \frac{2\pi n_m}{c} R^3 \left(\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right) \cdot \vec{\nabla} I(r, z). \quad (15)$$

З формули (15) видно, що при умові $n_p > n_m$ на частинку буде діяти сила, яка штовхатиме її до області з більшою інтенсивністю. Звідси слідує, що потенціали типу зображених на рис. 6, 8 будуть для таких частинок фокусуючими. При зворотній нерівності $n_p < n_m$ ситуація буде протилежною – фокусуючим буде потенціал типу зображеного на рис. 3.

Висновки

Продемонстрований аналітичний метод синтезу довільних тривимірних розподілів інтенсивності світлового поля дозволяє прогнозувати створення з його застосуванням оптичних маніпуляторів для широкого кола різноманітних частинок: від атомів КБЕ до молекул у різних розчинах. Слід підкреслити, що при використанні саме такої схеми існує можливість захоплення частинок у 3D-пастки, утримування їх, а також здійснення таких самих дій з ансамблями частинок. Реальність таких операцій відкриває широкі можливості для створення віртуальних (фактично "підвішених у вакуумі") систем нанотехнології та атомарної електроніки.

Неважко зробити оцінку ефективності такої системи. З (12) випливає, що максимальна висота індукованої потенціальної ями визначається виразом

$$V_{pond(max)} \approx \frac{1}{2m} \left(\frac{\vec{d}}{c} \right)^2 |A_0|^2 / a^2 = \frac{2J\pi d^2}{m\omega^2 c a^2}, \quad (16)$$

в якому A_0 – амплітуда вектор-потенціалу, a – характерний розмір потенціальної ями, J – інтенсивність лазерного поля, ω – його частота.

Для помірного лазерного поля з інтенсивністю $J = 10^6$ Вт/см² і частотою $\omega = 10^{15}$ с⁻¹, яке утворює потенціальну яму шириною $a = 100$ мкм, глибина ями для диполя з масою $m = 10^{-22}$ г та дипольним моментом $d = 1$ Дебай дорівнює $V_{pond(max)} \approx 0.1$ еВ, що в 2.5 разів більше, ніж енергія теплового руху. Це означає, що частинки будуть стійко утримуватися в такій ямі при кімнатній температурі.

Відзначимо також, що з появою ефективних оптичних модуляторів світла, які являють собою комп'ютерно генеровані голограми, стало можливим створення довільних початкових профілів інтенсивності [7], що відкриває додаткові можливості для синтезу полів будь-якої конфігурації, в тому числі й таких, що мають бездифракційні властивості.

Література

1. Durnin J., Miceli J.J., Eberly J.H. Diffraction-free beams. // *Physical Review Letters*, 58. – 1987. – P. 1499-1501
2. K. Dholakia, G. Spalding, M. MacDonald, Optical tweezers: the next generation, *Phys. World* 15, 31, 2002
3. J. Arlt, K. Dholakia, J. Soneson, E. Wright Optical dipole traps and atomic waveguides based on Bessel light beams – *Phys. Rev. A*, Vol. 63, 2001
4. Ахманов С.А., Дьяков Ю.Е., Чиркин А.С. Введение в статистическую радиофизику и оптику. – М.: Наука, 1981. – с. 320 – 326
5. M. Zamboni-Rached Stationary optical wavefields with arbitrary longitudinal shape by superposing equal frequency Bessel beams: Frozen Waves, *Optics Express* 12, 4001-4006, 2004
6. Высоцкий В.И., Кузьмин Р.Н. Каналирование квантов и нейтральных частиц в кристаллах. – *Успехи физических наук*, 162, -1992.- с. 2 - 47
7. J. Rosen, A. Yariv Synthesis of an arbitrary axial field profile by computer generated holograms, *Optics Letters* 19, 843-845, 1994

Надійшла до редколегії 17.03.2006

УДК 537.86; 535.082.54

Валерій І. Григорук,
Григорій В. Понежа*,
Сергій Г. Понежа

Голографічна інтерферометрія рідин при міліметровому опромінюванні

За допомогою диференціального голографічного інтерферометра досліджено зміни оптичного показника заломлення низки органічних рідин, води та деяких біологічних водних розчинів при дії на них електромагнітним випромінюванням у діапазоні частот 37,5 – 78 ГГц. Встановлено, що опромінювання інтенсивністю до 10 мВт/см^2 може спричиняти в рідинах зменшення оптичного показника заломлення $\sim 10^{-3}$, і що це є прямим наслідком теплових змін діелектричної сталої речовини.

Ключові слова: інтерферометрія, мікрохвилі, показник заломлення

Valeriy I. Grygoruk,
Grygoriy V. Ponezha*,
Sergiy G. Ponezha

Holograph interferometry of fluids under microwave irradiation

With the help of a differential holograph interferometer, the changes in refractive indices of a number of organic fluids, water, and some biological water solutions under the influence of an electromagnetic irradiation in the range of 37.5 – 78 GHz have been investigated. It was shown that the irradiation with the power up to $10 \text{ }\mu\text{W}$ can produce the refractive indices reduction of the order of $\sim 10^{-3}$. These changes are a direct consequence of thermal changes of fluid dielectric constants.

Key Words: microwaves, refractive index, interferometry

*E-mail: grponezha@academy.gov.ua

1. Вступ

Надзвичайно актуальною для радіофізики в останні 2–3 десятиріччя є проблема взаємодії низькоінтенсивного мікрохвильового електромагнітного випромінювання (ЕМВ) з біологічними об'єктами. Всебічне вивчення цієї проблеми має фундаментальне значення як для науки в цілому (дослідження цієї проблеми може бути пов'язано з фундаментальними основами життя) [1], так і в галузі застосування цих хвиль у біології та медицині [2–4].

На жаль, дослідження фізичних механізмів впливу міліметрових електромагнітних хвиль на живі організми відстають від реалізації цих хвиль у практичній медицині. Зокрема, на сьогодні відсутня загальноприйнята точка зору на такі механізми. Це обумовлено насамперед тим, що експериментальна ситуація в деяких випадках містить значні непевності й протиріччя не тільки в кількісному, але й у якісному відношенні.

Однією з найважливіших проблем при використанні мікрохвиль у

медицині є об'єктивізація мікрохвильового впливу. Багато задач, пов'язаних із зазначеною проблемою, мають пряме відношення до радіофізики і можуть бути вирішені радіофізичними методами та засобами. Насамперед - це вивчення мікрохвильових спектрів поглинання, відбиття та пропускання для біологічних об'єктів (у тому числі – для людського організму) та їхнього власного мікрохвильового ЕМВ [5,6].

Тому надзвичайно важливими є також дослідження змін макроскопічних фізичних характеристик об'єктів (зокрема, оптичного показника заломлення) при мікрохвильовому опромінюванні у реальному режимі часу. Цій меті найкраще відповідає метод диференціальної голографічної інтерферометрії [7, 8]. В голографічній інтерферометрії, на відміну від звичайної, оптичної [9], інтерферуючі хвилі розповсюджуються одним і тим же шляхом, але у різні моменти часу. Вигляд інтерференційної картини обумовлений лише змінами, які відбулися з об'єктом за час між записом голограми і моментом спостереження, й однозначно пов'язаний з цими змінами.

Цей метод був використаний у [10,11] для дослідження впливу міліметрового випромінювання на оптичний показник заломлення n 2-10 %-них водних розчинів плазми крові. Автори [10,11] стверджують, що зміни Δn оптичного показника заломлення на два порядки перевищують теплові зміни діелектричної сталої розчину. Однак, проведені нами подібні експериментальні дослідження дають підстави стверджувати, що такий висновок є необґрунтованим, зокрема тому, що в [10,11] не були ретельно враховані температурні ефекти.

Для того, щоб зрозуміти природу впливу мікрохвильового випромінювання на організм людини й отримати об'єктивні характеристики цього впливу, важливими є дослідження впливу цього випромінювання на фізичні властивості біологічних рідин та порівняння їх із змінами, які відбуваються в тих же умовах в органічних передбіологічних рідинах з відомими фізичними характеристиками та воді. В цій роботі за допомогою диференціального голографічного інтерферометра досліджено зміни Δn оптичного показника заломлення n низки органічних рідин, води, водних розчинів, плазми крові людини та культури клітин лімфосаркоми щурів (ЛСЦ) при дії на них електромагнітним випромінюванням у діапазоні частот 37,5 – 78 ГГц та ретельному врахуванні температурних ефектів.

2. Методи дослідження та матеріали

Вимірювали зміни показника заломлення під дією випромінювання за допомогою диференціального голографічного інтерферометра ПД-2. Принцип голографічної інтерферометрії легко зрозуміти з рис. 1, на якому зображена оптична схема отримання голограми і відновлення записаної на ній хвилі за допомогою приладу ПД-2.

Випромінювання малопотужного He-Ne лазера 1 за допомогою світлороздільного кубика 2 поділяється на два когерентних пучки: об'єктний і опорний. На шляху об'єктного пучка розташовані дзеркало 3 і коліматор 4, який формує паралельний пучок світла діаметром ~ 5 см. Поворотом прозорої скляної пластинки 5 змінювали напрямок розповсюдження поточного об'єктного пучка. В об'єктному пучку розміщували поряд дві кювети 6 з досліджуваними рідинами: одну – основну (робочу) і другу – контрольну. Опромінювали рідини в основній кюветі через відрізок прямокутного хвилеводу, який через верхню відкриту частину кювети на 2 – 3 мм занурювали у рідину. Щоб рідина не потрапляла всередину хвилеводу, останній з торця був заглушений фторопластовою вставкою (або закритий поліетиленовою плівкою товщиною 0,3 мм).

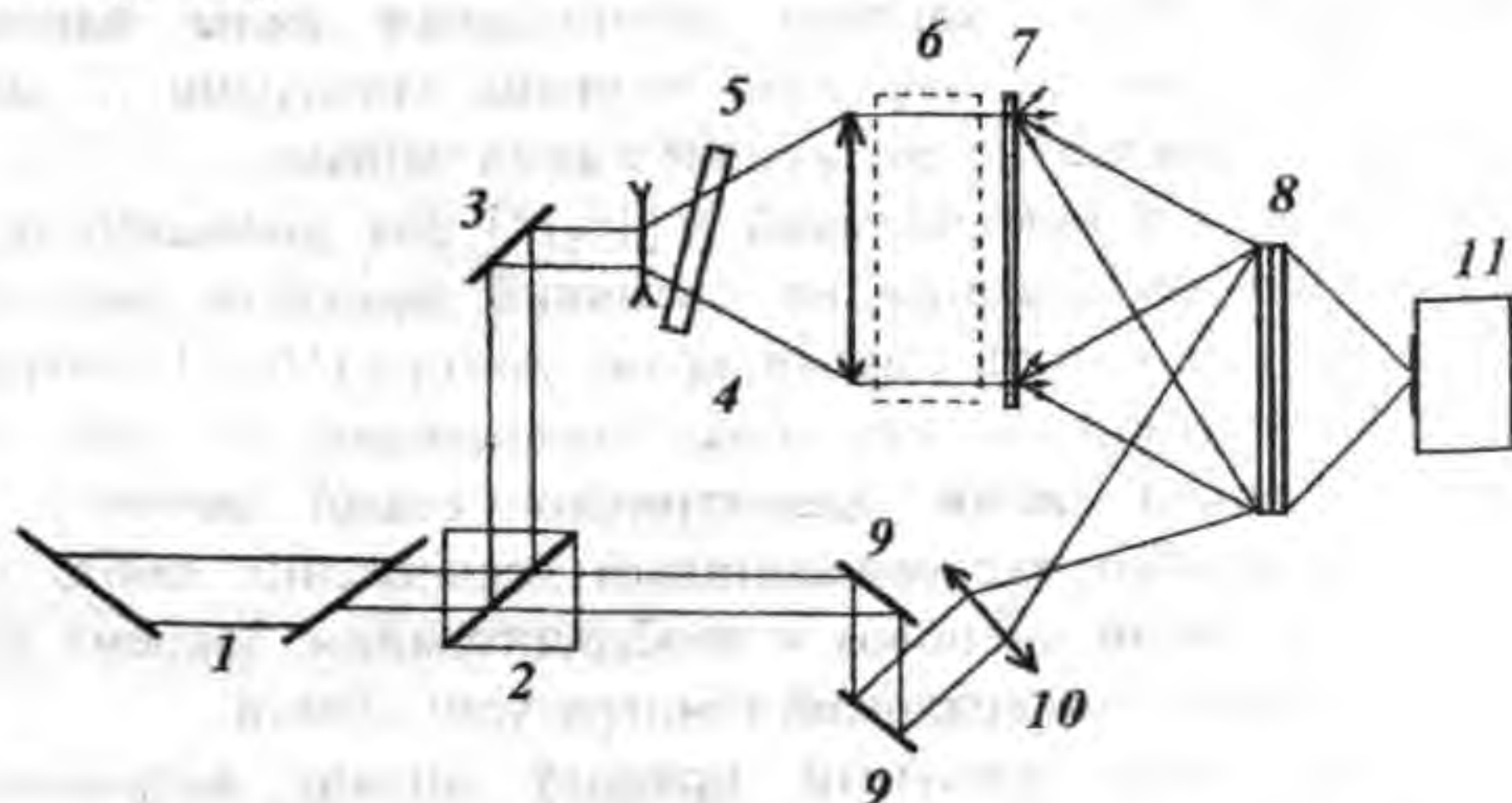


Рис. 1 Оптична схема диференціального голографічного інтерферометра ІГД-2

Після кювет 6 об'єктний пучок потрапляє на дрібнодисперсний дифузійний розсіювач 7 і далі – на світлочутливий термопластик 8. На площину термопластика дзеркалами 9 і об'єктивом 10 направляється й опорний пучок. Інтерферуючи з об'єктним, він формує у площині термопластика 10 фазовий рельєф. Для записування утвореної голограми на термопластик від електронного блоку подавався короткий електричний високовольтний імпульс.

Голограма, освітлена опорною хвилею, перетворює її в копію об'єктної хвилі, записаної у вихідному положенні об'єкта (нульовий відлік часу). Відновлена голограмою вихідна об'єктна хвиля інтерферує з поточною об'єктною хвилею, розсіяною об'єктом безпосередньо при його освітленні. В результаті інтерференції виникають смуги нескінченної ширини. Для отримання горизонтальних смуг скінченної ширини після

записування голограми поворотом пластинки 5 змінювався напрям розповсюдження предметного пучка на кут δ (у вертикальній площині).

В результаті інтерференції двох предметних хвиль, що розповсюджуються під кутом δ одна до одної, утворюється система горизонтальних несучих смуг, просторова частота яких дорівнює $\nu = 2 \lambda^{-1} \sin(\delta/2)$ [8]. Змінюючи поворотом пластинки 5 кут δ , можна управляти частотою несучих смуг ν . Спотворення, внесені до предметної хвилі досліджуванним об'єктом, будуть виявлятися у вигляді зсуву та викривлення несучих смуг. Результуючу інтерференційну картину реєстрували за допомогою телекамери 11, з'єднаної з комп'ютером, який використовували для записування та обробки інтерферограм.

За напрямком зсуву ("вгору" – "вниз") смуг під дією зовнішніх чинників можна судити про знак ("додатний" – "від'ємний") зміни оптичного шляху об'єктного пучка. За величиною зсуву можна визначити інтегральні по лінії спостереження зміни оптичного шляху Δl , за якими розраховують локальні значення змін показника заломлення Δn . Зсув на одну інтерференційну смугу відповідає зміні оптичного шляху на довжину хвилі λ лазерного випромінювання ($\lambda = 0,63$ мкм). Якщо через базову лінію (горизонтальну лінію відліку) за час спостереження проходить ΔN несучих смуг, то $\Delta l = \lambda \Delta N$. Зміна оптичного шляху безпосередньо зв'язана із зміною показника заломлення співвідношенням $\Delta n = \Delta l / d$, де d – товщина кювети.

Для досліджень вибирали рідини, прозорі на довжині хвилі He-Ne лазера $\lambda = 0,63$ мкм. Досліджували низку органічних рідин: бензол C_6H_6 , пара-, мета- і орто-ксилоли $C_6H_4(CH_3)_2$, толуол $C_6H_5(CH_3)$, чотирихлористий вуглець CCl_4 , бутанол $C_4H_{10}O$, етанол C_2H_5OH і ацетон C_3H_6O , а також воду. Фізичні властивості цих речовин, а саме: дипольний момент молекули, динамічна в'язкість, оптичний показник заломлення і його температурний коефіцієнт, які в основному визначають величину та динаміку змін оптичного показника заломлення при мікрохвильовому опромінюванні, добре відомі [12].

Крім чистих рідин, досліджували й такі біологічні об'єкти: 2 %-й водний розчин плазми крові людини та суспензійну культуру лімфосаркоми щурів (ЛСЩ), яка складалася із 45 % середовища Ігла з глютаміном, 45 % гідролізату лактоальбуміну, 10 % сироватки великої рогатої худоби і по 100 од. на 1 мл середовища антибіотиків (пеніцилін і стрептоміцин). Для дослідів брали культуру через добу після пересівання. Готували суспензію, яка вміщувала по 100 тис. клітин у 1 мл живильного середовища, яке потім розташовували на 1 год. у холодильник при $+4^\circ C$ для синхронізації клітин.

У процесі вимірювань температуру рідини контролювали з

невизначеністю $\approx 0,1$ К термопарою “мідь-константан” з чутливістю ≈ 40 мкВ/град. Діаметр кульки термопари не перевищував 0,4 мм. Один спай термопари розміщували в рідинах на різній глибині (на базовій лінії) залежно від величини коефіцієнта поглинання рідиною мікрохвильового ЕМВ. Другий спай термопари розміщували у термосі при температурі танення льоду. Напругу термо-е.р.с. вимірювали цифровим універсальним вольтметром В7-21А.

3. Експериментальні результати

У процесі досліджень було отримано велику кількість інтерферограм при опромінюванні зазначених речовин мікрохвильовим випромінюванням т.зв. “нетеплової” інтенсивності (до 10 мВт/см²), яка не повинна викликати біологічно значущих змін температури ($< 0,1$ К). Саме таку інтенсивність використовують для клінічних цілей. Використаний метод дозволив з’ясувати міру чутливості досліджуваних речовин до ЕМВ на певних частотах.

У рідинах з симетричними молекулами, що не мають постійного дипольного моменту (таких як CCl_4 , пара-ксилол та бензол), мікрохвильове ЕМВ поглинається слабо ($\alpha_{\text{мх}} < 0,03$ см⁻¹) і зміни в інтерференційних картинах незначні. Для рідин з помірним мікрохвильовим коефіцієнтом поглинання: толуолу ($\alpha_{\text{мх}} \approx 0,22$ см⁻¹), метаксилолу ($\alpha_{\text{мх}} \approx 0,21$ см⁻¹), орто-ксилолу ($\alpha_{\text{мх}} \approx 0,4$ см⁻¹), етанолу, бутанолу й ацетону спостерігалися складні інтерференційні поля, обумовлені об’ємним поглинанням мікрохвильового випромінювання, яке проникає на глибину $\sim \alpha_{\text{мх}}^{-1}$. Це проілюстровано на рис. 2, де наведено інтерферограми для бензолу (б) і толуолу (в), які були отримані після 3-хвилинного мікрохвильового опромінювання щільністю ~ 10 мВт/см². Для порівняння на рис. 2(а) наведено також інтерферограму бензолу без опромінювання.

Було також встановлено, що при великих значеннях коефіцієнта $\alpha_{\text{мх}}$ поглинання мікрохвильового випромінювання (характерного, наприклад, для води, де $\alpha_{\text{мх}} \approx 22$ см⁻¹) зміни оптичного показника заломлення експоненціально залежать від глибини. Мікрохвильове випромінювання поглинається тонким шаром речовини безпосередньо під хвилеводом, а далі тепло, внаслідок теплопровідності, за експоненціальним законом поширюється в глибину і спричинює зміни оптичного показника заломлення.

Дослідження на біологічних об’єктах показали, що в них характер змін показників заломлення при мікрохвильовому опроміненні співпадає з тим, що має місце у чистій воді. Цього й треба було очікувати, враховуючи те, що досліджувані біологічні об’єкти, як і нативні біологічні рідини, значною мірою складаються з води.

Результати наших досліджень однозначно свідчать про те, що зміни

Δn для досліджуваних рідин, зареєстровані за допомогою інтерферометра, під впливом ЕМВ за абсолютною величиною в межах невизначеності експериментальних результатів повністю відповідають значенням $\Delta n = \Delta T \cdot (dn/dT)$. Останні отримані з даних зміни температури ΔT та табличних значень температурного коефіцієнта dn/dT показника заломлення. Експериментально було встановлено також, що у воді та водних розчинах біологічних речовин нагрів рідини у тонкому шарі безпосередньо під хвилеводом при тривалому опроміненні може досягати $5-7^\circ \text{C}$.

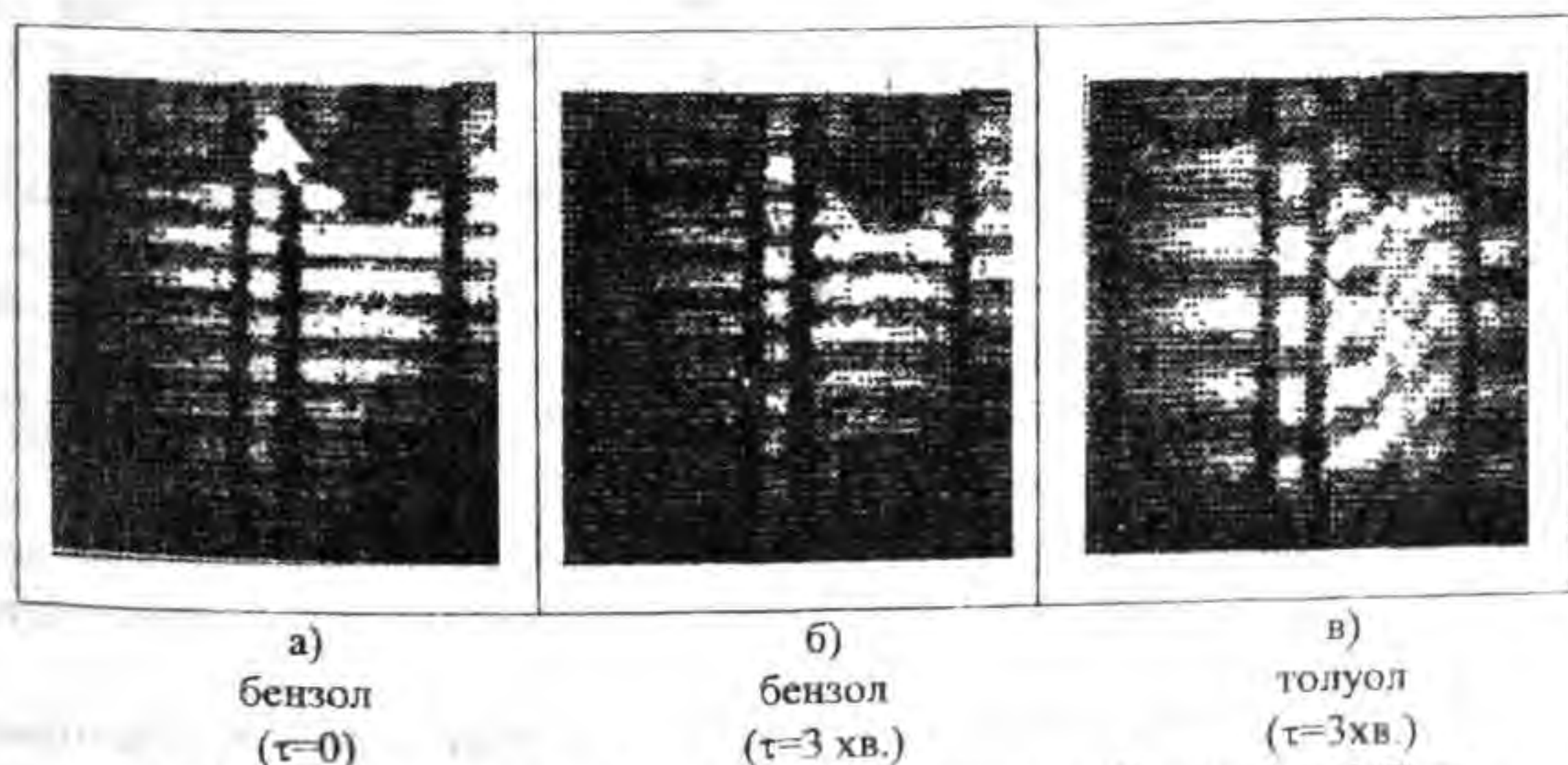


Рис.2 Динаміка інтерференційних картин у бензолі (а і б) та толуолі (в). Праворуч – основна (робоча) кювета, ліворуч – контрольна кювета. τ – час опромінювання

4. Заключення

Проведені дослідження, в яких при мікрохвильовому опромінюванні контролювалась температура рідини, показують, що міліметрове випромінювання в діапазоні частот $37,5-78 \text{ ГГц}$ інтенсивністю $\sim 10 \text{ мВт/см}^2$ спричинює в рідинах зміни оптичного показника заломлення $\sim 10^{-3}$. Зміни показника заломлення в різних рідинах різні за величиною, але однакового знаку, а саме, при опромінюванні показник заломлення зменшується. Ці зміни є прямим результатом теплових змін діелектричної сталої речовини.

При великих значеннях коефіцієнта поглинання мікрохвильового випромінювання, наприклад, для води, зміни оптичного показника заломлення експоненціально залежать від глибини, що характерно для процесів теплопередачі. У біологічних об'єктах характер змін показників заломлення повністю співпадає з тим, що має місце у воді.

Окрім того, треба зазначити, що величина і динаміка змін

оптичного показника заломлення при мікрохвильовому опромінюванні визначаються експозицією опромінювання та фізичними параметрами об'єктів дослідження (дипольним моментом молекул, в'язкістю, теплоємністю і теплопровідністю рідин, їхнім температурним коефіцієнтом оптичного показника заломлення) і в межах невизначеності результатів вимірювань не залежать від взаємної орієнтації ортів поляризації мікрохвильового і оптичного полів.

Література

1. Бинги В.Н., Савин А.В. Физические проблемы действия слабых магнитных полей на биологические системы//УФН.– 2003.– Т. 173, № 3.– С. 265 – 300.
2. Миллиметровые волны в биологии и медицине (библиография).– М.: Научно-методический центр ЗАО "МТА-КВЧ", 1996. – 39 с.
3. Ситько С.П., Мкртчян Л.Н. Введение в квантовую медицину.– Киев: "Паттерн", 1994.–147 с.
4. Теппоне М.В. Многозональная КВЧ-терапия или КВЧ-пунктура.– М.: "Колояро", 1997.– 250 с.
5. Понежа Г.В., Понежа С.Г., Нижельская А.И. Физические аспекты измерений микроволнового электромагнитного излучения человека// Физика живого.– 2001.– Т.9, N2.– С. 33 – 54.
6. Григорук В.І., Понежа Г.В., Понежа С.Г., Ніжельська А.І. Вимірювання коефіцієнта відбиття тіла людини в міліметровій області довжин хвиль//Вісник Київ. ун-ту. Серія: радіофізика та електроніка. Київ: Вид-во Київ. ун-ту. Вип.5, 2003.– С. 21 – 22.
7. Вест Ч. Голографическая интерферометрия. – М.: Мир, 1982. – 504 с.
8. Островский Ю.И., Щелинов В.П., Яковлев В.В. Голографические интерференционные методы измерения деформаций.– М.: Наука. Гл.ред.физмат.лит., 1988. – 248 с.
9. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970. – 855 с.
10. Бережинский Л.И., Гридина Н.Я., Довбешко Г.И., Лисица М.П., Литвинов Г.С. Голографическая интерферометрия плазмы крови, находящейся под воздействием миллиметрового излучения //Докл. АН Украины.–1991.– N 12.– С. 46 – 49.
11. Бережинский Л. И., Гридина Н.Я., Довбешко Г. И., Лисица М. П., Литвинов Г.С. Визуализация действия миллиметрового излучения на плазму крови //Биофизика.– 1993.– Т. 38, вып. 2.– С. 378 – 384.
12. Краткий справочник физико-химических величин. Изд. 8-е, перераб./ Под ред. А.А. Равделя и А.А Пономаревой.– Л.: Химия, 1983.– 232 с.

Надійшла до редакції 05.03.2006

УДК 621.315.592

Валентин М.Добровольський,
Лариса В. Іщук, Сергій
П.Павлюк*, Віктор М. Кисліцин

Valentin N. Dobrovolsky, Larisa V.
Ishchuk, Sergey P. Pavljuk*, Viktor
M. Kislitsyn

**Залежність теплопровідності
діодного кристала від орієнтації
 p - n переходу**

**The heat conductivity of silicon
diode depending on the direction of
 p - n junction**

У роботі досліджено нестационарне поширення тепла крізь p - n перехід напівпровідникового діодного кристала при його імпульсному розігріві з однієї сторони. Виявлено різну швидкість проходження теплового фронту вздовж кристала в залежності від його орієнтації. Дано пояснення ефектів, що спостерігаються.

By the investigating of the unsteady heat conductivity trough the p - n junction of a silicon diode by the pulsed one-sided heating was revealed the phenomenon of heat flow inequality. There are discussed the explanation of this effect.

Ключові слова: температура, аномальність, діод, теплопровідність.

Key Words: temperature, abnormality, diode, thermal conductivity.

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

Зборка напівпровідникових приладів є однією із найважливіших операцій по виготовленню виробів електронної техніки. Зокрема, питання приєднання металевих виводів до напівпровідникових кристалів вирішується декількома способами, кожний з яких має свій набір переваг і недоліків.

Розглянемо ситуацію на прикладі пайки зовнішніх виводів до діодних структур середньої потужності. Традиційна технологія зборки діодів базується на груповому способі приєднання виводів до кристала кремнію методом пайки у водневій печі та характеризується наступними недоліками: відсутністю оперативного контролю якості паяння і необоротною зміною вихідних електричних параметрів діодних структур, необхідністю використання вибухонебезпечного устаткування (печей, генераторів водню) і спеціальних приміщень, підвищеною витратою енергоресурсів, складальних касет.

Поряд із традиційними методами зборки відомі і технології індивідуальної зборки діодів за допомогою способу зварювання-паяння з нагріванням електроопором [1]. При цьому способі роль нагрівача виконує сам напівпровідниковий кристал, крізь який пропускають струм у прямому напрямку щодо p - n переходу. Величина цього струму достатня для його нагрівання до температури плавлення припою, нанесеного на притиснуті до нього виводи приладу. Однак, у цьому випадку кількість виділеного тепла в напівпровідниковій діодній структурі залежить від індивідуальних

електрофізичних властивостей окремого кристала, що викликає необхідність використання спеціальних схем стабілізації вихідних параметрів джерела розігріву.

В останні роки для паяння виводів до напівпровідникового діодного кристала використовують спосіб індивідуального непрямого нагрівання, наприклад, потоком газу, нагрітого до температури, що забезпечує плавлення припою на виводах, або за допомогою імпульсного непрямого нагрівання від зовнішнього електричного нагрівача [2]. В цих випадках по товщині напівпровідникової діодної структури виникає нестационарний потік тепла. Швидкість цього потоку тепла повинна якимось чином залежати від теплофізичних параметрів n - і p -областей діодної структури.

Тому метою даної роботи є дослідження процесу нестационарного переносу тепла крізь p - n перехід при різній його орієнтації стосовно джерела нагрівання, тобто при напрямку потоку тепла від n - до p -області і навпаки.

Результати такого роду досліджень будуть корисні технологам і розроблювачам нових типів пристроїв з напівпровідниковими матеріалами.

1. Методика проведення експерименту

Дослідження проводилися на напівпровідникових кристалах діодів марки КД 105 і КД 209, виготовлених із кремнію марки КЕФ-40 з питомим опором бази $\rho = 40$ Ом·см, концентрацією донорів порядку 10^{14} см $^{-3}$. З одного торця кристала дифузією бора була створена p^+ область з питомим опором $\rho = 0,1$ Ом·см, концентрацією акцепторів порядку 10^{17} см $^{-3}$ і товщиною 0,01 см, а з іншого торця дифузією фосфору отримана область n^+ контакту до n -області. Кристали мали циліндричну форму діаметром 0,18 см, товщиною 0,03 см.



Рис.1. Схема проведення експерименту

Схема експериментальної установки представлена на рис.1, основним елементом якої є імпульсний електричний нагрівач 1, на якому проводили нагрівання досліджуваного модуля, що складається з діодної структури 2, розташованої між двома термокомпенсаторами 3, виготовлених у вигляді золочених коварових дисків із привареними до них виводами двох термопар. Досліджуваний модуль перед початком експерименту піддавали

попередньому нагріванню для забезпечення "прихоплення" усіх трьох елементів (діодної структури між двома термокомпенсаторами) у монолітний блок, наступний поділ якого неможливий без руйнування кристала кремнію.

Таким чином, контактні теплові опори між торцями p - і n -областей діодної структури і приєднаними до них термокомпенсаторами були надійно зафіксовані перед проведенням вимірів. У зв'язку з цим, за даних умов були відсутні фактори, що могли б вплинути на зміну величини перехідного теплового опору при перевероті досліджуваного модуля на поверхні нагрівального елемента для зміни орієнтації p - n переходу щодо джерела нагрівання.

Час нагрівання діодної структури змінювали у межах 2-10 сек. Температуру нагрівання термокомпенсаторів фіксували за допомогою підсилювача осцилографа з пам'яттю. Виміри температури проводили при різній орієнтації діодного кристала стосовно нагрівача шляхом почергового перевертання досліджуваного модуля на поверхні нагрівача.

2. Результати експерименту

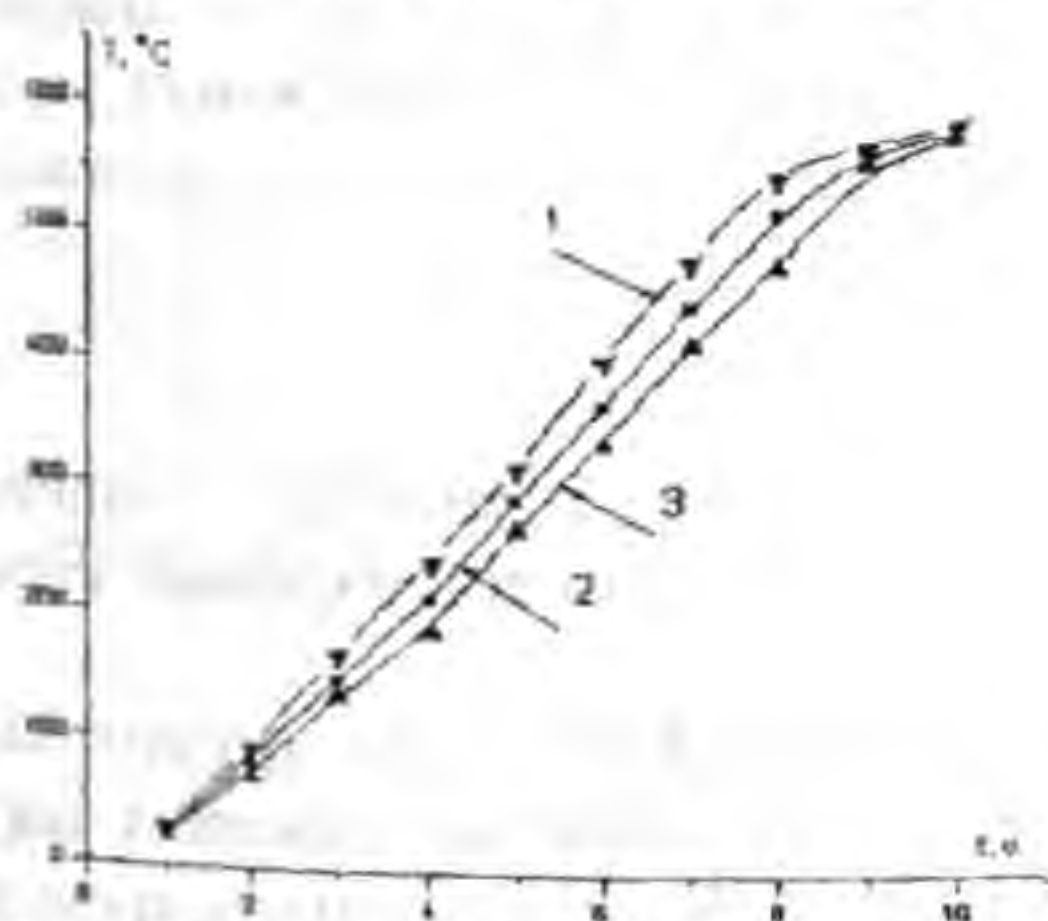


Рис.2. Криві розігрівів n та p^+ -областей діодного кристала. 1 - розігрів нижньої термодіоди; 2 - зміна температури верхньої сторони діодного кристала у випадку, коли вгорі розташована p^+ -область, а внизу - n -область; 3 - зміна температури верхньої сторони, коли вгорі розташована n -область, а внизу - p^+ -область.

На рис.2 показані криві нагрівання термокомпенсаторів, з'єднаних з n - і p^+ -областями діодної структури. Крива 1 відображає показання термодіоди, закріпленої на термокомпенсаторі, розташованому між нагрівачем і n -областю структури. Крива 2 представляє нагрівання термокомпенсатора, що контактує з верхньою площадкою структури (з p^+ -областю). При перевертання модуля щодо нагрівача зміна температури верхнього термокомпенсатора, з'єднаного з n -областю структури, показана кривою 3.

Як видно з рис. 2, швидкість поширення тепла з n -області в p^+ -область виявляється більше, ніж при зворотній орієнтації. Різниця температур при проходженні фронту тепла від n -області до p^+ -області (крива 1) менше, ніж навпаки - (крива 2), і досягає 70 градусів.

3. Обговорення отриманих результатів.

Розглянемо як проходять процеси переносу тепла у діодному кристалі в умовах нашого експерименту. При відсутності додаткового нагрівання всі домішки в p і n -областях кристала іонізовані. Концентрація дірок у p^+ -області складає $\sim 10^{17} \text{ см}^{-3}$, а електронів у n -області - 10^{14} см^{-3} (вихідні дані діодної структури).

Модель переносу тепла в досліджуваному об'єкті може бути наступна. При розігріві p^+ контакту в p -області відбувається термогенерація електронів і дірок, і при температурі нагрівання, використаної в нашому експерименті ($\sim 550^\circ \text{C}$) відповідно [3], їхня концентрація складає близько 10^{16} см^{-3} , що на порядок менше домішкової концентрації акцепторів N_a . У цьому випадку рівень Фермі майже не змінює своє положення. Ці додаткові електронно-діркові пари дифундують у напрямку n -області, а також рекомбінують у p -області, причому другий процес домінуючий.

При нагріванні розглянутого модуля з боку n контакту в n -області відбувається також термогенерація електронно-діркових пар. Їхня концентрація на кілька порядків перевищує концентрацію донорів N_d . Тому ця область діодного кристала при великій температурі здобуває рівень власної провідності. Рівень Фермі зміщується до середини забороненої зони, що зменшує потенційний бар'єр. Електронно-діркові пари дифундують у p^+ -область крізь занижений бар'єр і рекомбінують, виділяючи поглинену при термогенерації енергію. Таким чином, швидкість теплопереносу в цьому напрямку буде більше, ніж у протилежному напрямку, що і показують експериментальні дані (рис. 1, 2).

Висновки

1. Проведені експериментальні дослідження виявили залежність теплопровідності в p^+ - n діодних кристалах від їхньої орієнтації стосовно потоку тепла.
2. Запропоновано модель механізму даного ефекту, що ґрунтується на істотному внеску в процес теплопровідності електронно-діркових пар, які прискорюють процес поширення тепла, тобто, збільшують теплопровідність напівпровідникових матеріалів.
3. Виявлений ефект може бути використаний для спрямованого керування величиною теплопровідності матеріалів з напівпровідниковими властивостями при виготовленні теплових екранів, тепловідвідів і нагрівачів.

Література

1. Кислицын В.М. Технология пайки электросопротивлением кремниевых диодов. Автореф. дис. канд. техн. наук.: 05.03.06/ІЕЗ НАН України: ВОІ ІЕЗ ім. Е.О. Патона НАНУ. – К., 1987. – 16 с.
2. Павлюк, С.П., Россошинский А.А., Кислицын В.М., Кутлин Г.Н. Использование кремния в качестве нагревательных элементов микропаяльников. Автоматическая сварка, – 1999 - №2, С. 41-44.
3. С.Зи. Физика полупроводниковых приборов. – М, «Мир», 1984, с.с.80-91, 252-254.
4. Смит Р. Полупроводники: Пер. с англ. – М.:ИЛ. - 1962. - 468 с.

Надійшла до редакції 05.03.2006

УДК 538.221

Світлана А. Дяченко¹,
Валерій Ф. Коваленко,
Богдан М. Танигін²,
Олександр В. Тичко³

**Структура блохівських
доменних меж в
магнітоупорядкованому
кубічному кристалі з сильними
поллями розмагнічування**

Розглянуто вплив сильних полів розмагнічування зразка на структуру плоских блохівських доменних меж у кубічному (001)-кристалі з від'ємною першою константою магнітної анізотронії.

Ключові слова: доменна межа, поле розмагнічування, кубічна магнітна анізотронія.

¹ E-mail: dsa@univ.kiev.ua

² E-mail: tanyhin@univ.kiev.ua

³ E-mail: pasat@univ.kiev.ua

Svitlana A. Dyachenko¹,
Valeriy F. Kovalenko,
Bogdan M. Tanygin,
Oleksandr V. Tychko

**Bloch domain wall structure in
magneto-ordered cubic crystal
with strong demagnetization fields**

Influence of strong sample demagnetization field on the structure of plane Bloch domain walls in a cubic (001)-crystal with a negative first constant of magnetic anisotropy is considered.

Key Words: domain wall, demagnetization field, cubic magnetic anisotropy.

1. Sample demagnetization field of a magneto-ordered medium is one of the main factors determining sizes and a form of homogeneously magnetized regions (domains) of its domain structure [1]. For some samples (thin films, magnetic particles, etc.) this field also becomes the factor influencing a structure of an inter-domain transitive layer — domain wall (DW) [2-6]. In particular, demagnetization field in thin epitaxial magnetic ferrite-garnet (001)-films results in a deviation of a magnetization vector $\mathbf{M}$ in domain volumes from medium easy magnetization axes [7] and its reorientation in the film plane [8]. Formation of such "plane" domain structure becomes possible at presence of enough strong sample demagnetization field. In this paper the plane Bloch DW structure in cubic (001)-crystal with a negative first magnetic anisotropy constant K_1 is studied at the presence of strong sample demagnetization field, sufficient for vector $\mathbf{M}$ reorientation in sample plane.

2. Let's consider a cubic crystal with $K_1 < 0$ as unlimited thin (001)-plate. Spatial distribution of $\mathbf{M}$ in its volume at $|\mathbf{M}| = \text{const}$, is described by unit vector $\mathbf{a}$ ($\mathbf{M} = M\mathbf{a}$, where M — saturation magnetization; $\mathbf{a} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$; α_1, α_2 and

and, hence, $\Delta \mathbf{M} \cdot \mathbf{n} = 0$, that is all possible $\mathbf{n}$ orientations coincide with directions, that perpendicular to vector $\Delta \mathbf{M}$. The angle λ between the normal $\mathbf{n}$ and a plane of vectors $\mathbf{m}_1$ and $\mathbf{m}_2$ that coinciding with a plane of a plate, describes rotation $\mathbf{n}$ around of the vector $\Delta \mathbf{M}$ and sets of the DW plane orientation.

3. If the $\mathbf{M}$ direction describes by polar θ and azimuth φ angles that are accordingly counted out from $O\tilde{z}$ and $O\tilde{x}$ axes, then the $\mathbf{M}$ spatial distribution in the DW volume is described by variable φ (θ does not change in DW volume owing to preservation of normal components of $\mathbf{M}$: $\cos \theta = \cos \alpha \cos \lambda$). Orientation of $\mathbf{m}_1$ and $\mathbf{m}_2$ is set by the values φ that equal accordingly φ_1 and φ_2 (fig.1). Then in the coordinate system connected with the 90° -DW plane the energy density e_s can be presented in the following form:

$$e_s(\theta, \varphi) = p \{ 3 + (\cos 2\theta - \cos 2\lambda)(1 - \cos 2\varphi) + \cos 2\varphi - \cos 2\theta \cos 2\lambda (3 + \cos 2\varphi) - 4 \cos \varphi \sin 2\theta \sin 2\lambda \} + 8 + \{ 97 - 12(\cos 2\theta + \cos 2\varphi) - 9 \cos 4\lambda + 4 \cos 2\varphi (3 \cos 4\lambda - 4 \cos 2\theta) + \cos 4\varphi (28 \cos 2\theta - 21 - 3 \cos 4\lambda) - 4 \cos 2\theta \cos 4\lambda (5 - 4 \cos 2\varphi - \cos 4\varphi) - \cos 4\theta [7(3 - 4 \cos 2\varphi + \cos 4\varphi) + \cos 4\lambda (35 + 28 \cos 2\varphi + \cos 4\varphi)] / 512 + 16 \sin 2\theta \sin 4\lambda (\cos 3\varphi - \cos \varphi) - 8 \sin 4\theta \sin 4\lambda (7 \cos \varphi + \cos 3\varphi) \}$$

and in the coordinate system connected with the 180° -DW plane:

$$e_s(\theta, \varphi) = p \{ 3 + \cos 2\theta (1 - 3 \cos 2\lambda) - \cos 2\lambda + \cos 2\varphi (\cos 2\lambda + 1)(1 - \cos 2\theta) + 4 \cos \varphi \sin 2\theta \sin 2\lambda \} + 8 + \{ 415 + 4 \cos 2\theta [3 + 4 \cos 2\lambda (5 + 4 \cos 2\varphi) + 4 \cos 2\varphi] + 12 \cos 2\lambda (3 + 4 \cos 2\varphi) + 9 \cos 4\lambda (-3 + 4 \cos 2\varphi) + 12 \cos 2\varphi + \cos 4\varphi [7(3 - 4 \cos 2\theta - 12 \cos 2\lambda + 16 \cos 2\theta \cos 2\lambda) - 9 \cos 4\lambda] - 12 \cos 2\theta \cos 4\lambda (5 - 4 \cos 2\varphi - \cos 4\varphi) - \cos 4\theta [(-3 + 4 \cos 2\varphi - \cos 4\varphi) + 28 \cos 2\lambda (-5 + 4 \cos 2\varphi + \cos 4\varphi) + 3 \cos 4\lambda (7(5 + 4 \cos 2\varphi) + \cos 4\varphi)] + 16 \sin 2\lambda [2 \sin 2\theta (-\cos \varphi - 7 \cos 3\varphi) + 7 \sin 4\theta (\cos 3\varphi - \cos \varphi)] + 8 \sin 4\lambda \{ 6 \sin 2\theta (\cos \varphi - \cos 3\varphi) + \sin 4\theta (21 \cos \varphi + 3 \cos 3\varphi) \} / 2048 \}$$

For isolated plane DW the $\tilde{z}$ spatial distribution of a turn angle φ and specific energy σ can be presented as [11]:

$$\tilde{z} = \int_0^{\varphi_2} \sqrt{A \sin^2 \theta / (e_s(\theta, \zeta) - e_s^*(\theta, \varphi_1))} d\zeta,$$

$$\sigma = 2 \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \sqrt{A \sin^2 \theta / (e_s(\theta, \varphi) - e_s^*(\theta, \varphi_1))} d\varphi,$$

where A — an exchange constant, $\varphi_1 = -\varphi_0 < \varphi < \varphi_2 = +\varphi_0$ and $\varphi_1 = \varphi_0 < \varphi < \varphi_2 = 2\pi - \varphi_0$ — accordingly for the right- and left-handed rotation of $\mathbf{M}$, $\varphi_0 = \arccos(\cos \alpha \sin \lambda / \sqrt{1 - \cos^2 \alpha \cos^2 \lambda})$ — half of the angle between $\mathbf{m}_1$ and $\mathbf{m}_2$ projections on DW plane ($\alpha < \varphi_0 < \pi - \alpha$) [9,10].

For 180° -DW $\varphi_0 = \alpha = \pi/2$. Thus short ($\varphi_2 - \varphi_1 < \pi$) and long ($\varphi_2 - \varphi_1 > \pi$) ways of $\mathbf{M}$ turn [9,10] in DW volume are equal, and DW with the right- and left-handed $\mathbf{M}$ rotation are differ only orthogonal $\mathbf{n}$ orientations. For

90° -DW $\alpha = \pi/4$ and $\varphi_0 = \arccos(\sin \lambda / \sqrt{2 - \cos^2 \lambda})$. Then at $\lambda > 0$ right-handed (left-handed) $\mathbf{M}$ rotation will have a short (long) way of a turn. For $\lambda < 0$ the opposite situation will be realized: right-handed (left-handed) $\mathbf{M}$ rotation will have a long (short) way of a turn.

4. Orientation dependencies of specific energy $\sigma / \sin \psi$ (fig.a), and also equilibrium spatial distribution of the magnetization vector $\mathbf{M}$ orientation in DW volume (fig.b) for plane Bloch 180° -and 90° -DW are resulted in fig.2 and 3 accordingly. Here ψ — an angle between the (001)-plate surface and DW plane. For comparison, the corresponding dependencies for 109° -and 71° -DW are also presented respectively in fig.2b and 3b by dashed lines. The last are realized in cubic (001)-crystals with $K_1 < 0$ at $p \rightarrow 0$.

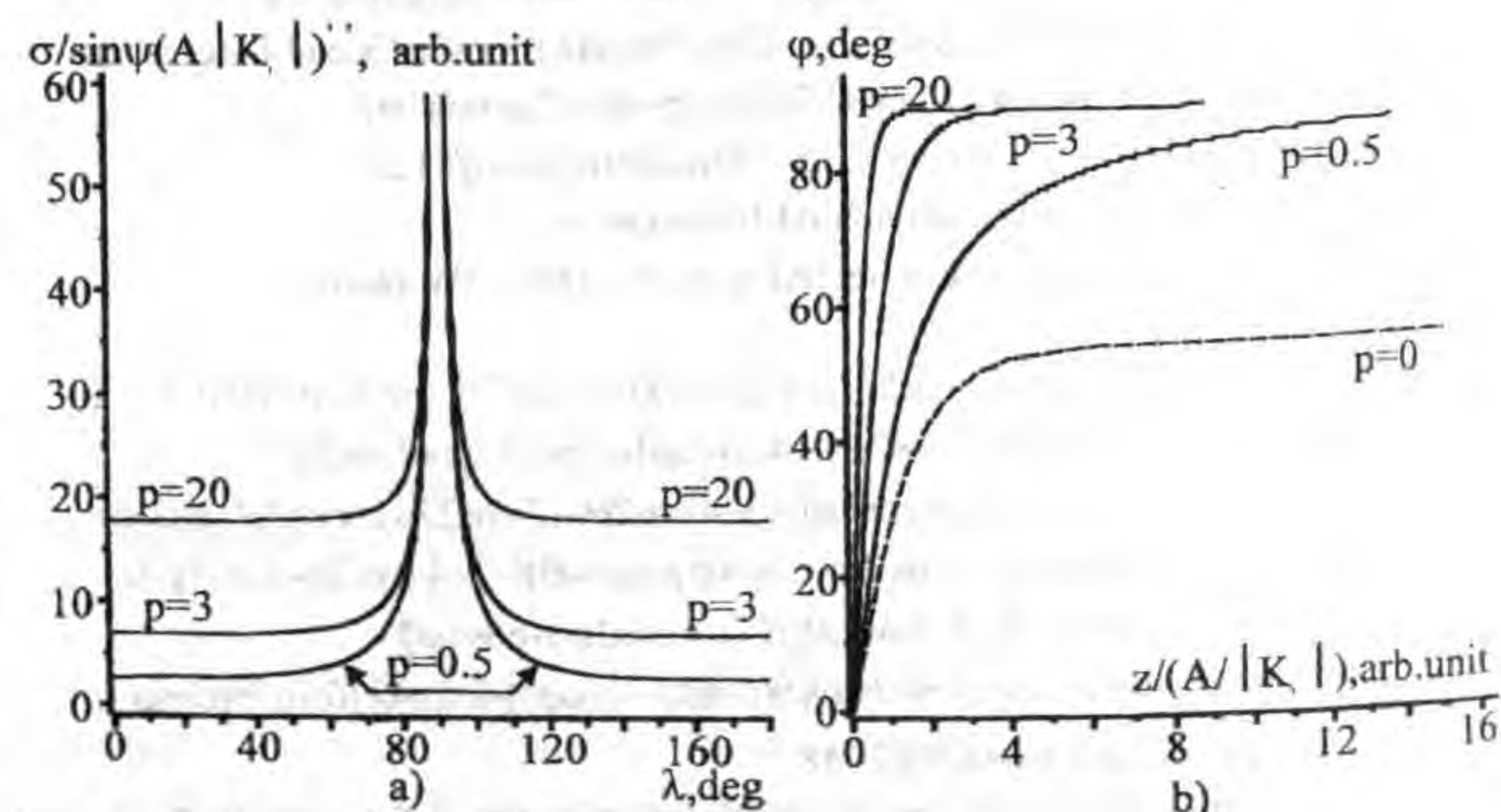


Fig.2

The symmetry of orientation dependence of the specific energy $\sigma / \sin \psi$ for 180° -DW with right- and left-handed $\mathbf{M}$ rotation (fig. 2a) is explained by the mentioned earlier identity of these DW with various turn ways and directions of the $\mathbf{M}$ rotation. For such DW $\varphi_0 = \pi$ at any values of p that is evidence of constant length of $\mathbf{M}$ turn. For 90° -DW the symmetry of orientation dependence $\sigma / \sin \psi$ and equilibrium orientations on a long way of the $\mathbf{M}$ turn are absent (fig.3a). It is possible to note, that the length L of $\mathbf{M}$ turn way ($L = (\varphi_2 - \varphi_1) \sin \theta$ [9,10]) grows at transition from 109° -DW with short way of $\mathbf{M}$ turn ($p=0$) to 180° -DW ($p>0.5$) (fig.2b). The way L for 90° -DW is shorter and longer than the corresponding parameter for 71° -DW with right- and left-handed $\mathbf{M}$ rotation respectively (fig.3b).

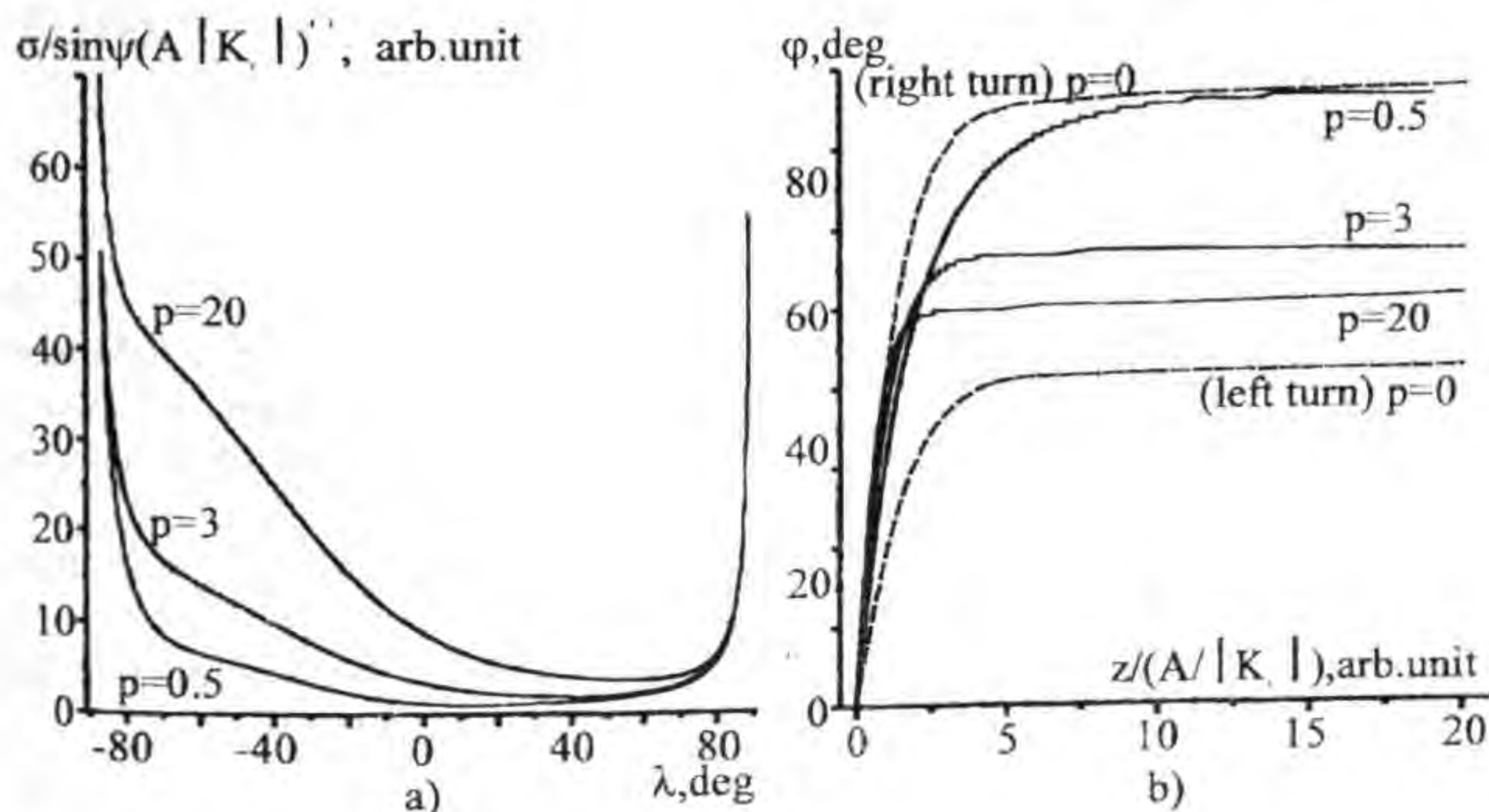


Fig.3

Dependencies of parameters for examined plane Bloch 180° - and 90° -DW via the value of sample demagnetization field are presented in fig.4a and 4b respectively.

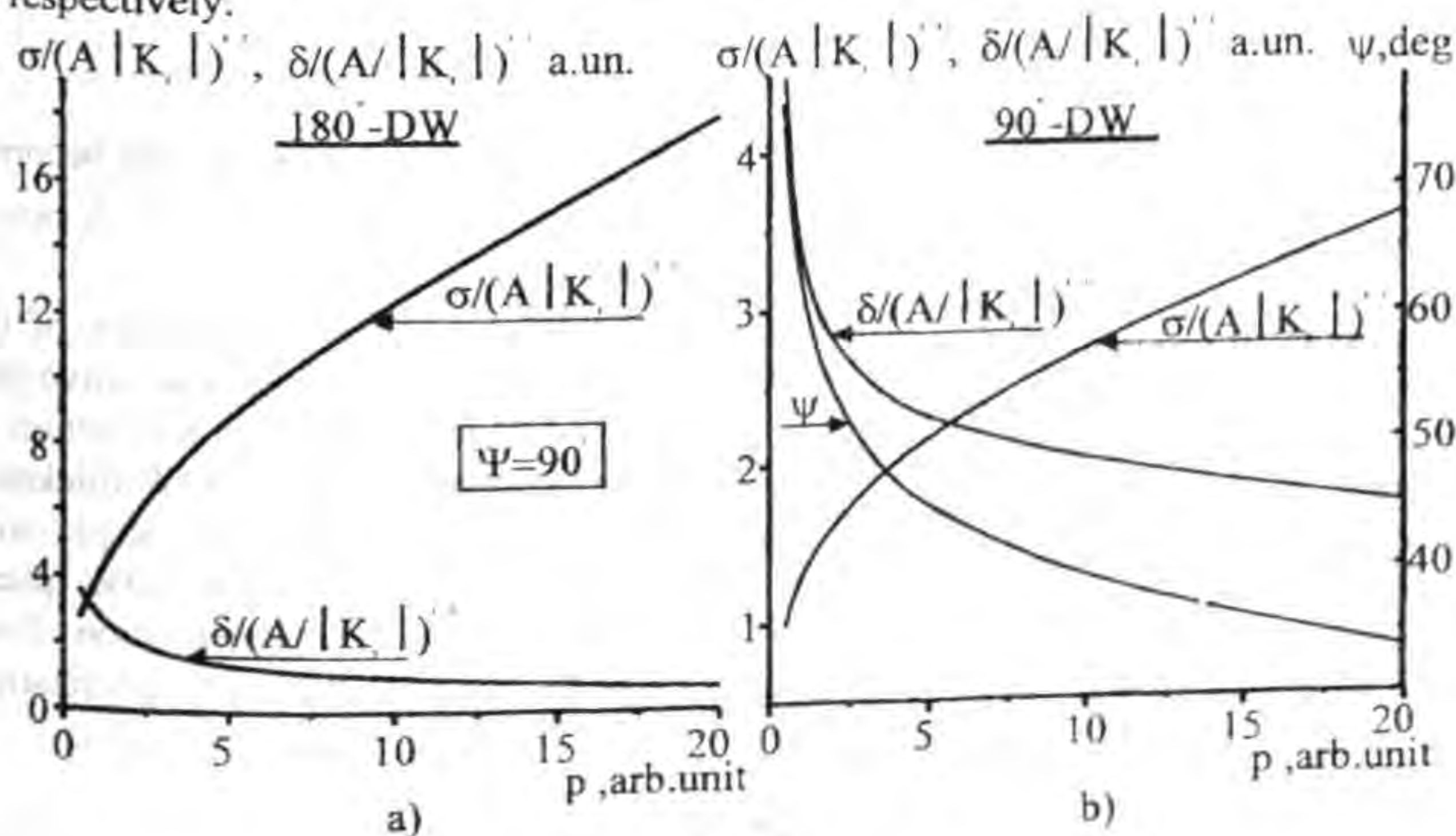


Fig.4

For $p \geq 0.5$ possible equilibrium 90° -DW orientations with short way of $\mathbf{M}$ turn are set by the expression:

$$p = [23 - 30 \cos 2\lambda - 37 \cos 4\lambda + 39 \cos 6\lambda + 13 \cos 8\lambda - 9 \cos 10\lambda + \cos 12\lambda +$$

$$+ \sqrt{2(3 - \cos 2\lambda)}(49 \sin \lambda + 3 \sin 3\lambda + 24 \sin 5\lambda - \sin 7\lambda - 6 \sin 9\lambda + \sin 11\lambda) / \\ \{4[25 + 21 \cos 2\lambda - 10 \cos 4\lambda - 5 \cos 6\lambda + \cos 8\lambda - \sqrt{2(3 - \cos 2\lambda)}(9 \sin \lambda + 12 \sin 3\lambda + \\ + 2 \sin 5\lambda - \sin 7\lambda)]\}.$$

Such walls have equilibrium orientations in a range $13.8^\circ \leq \lambda \leq 90^\circ$.

For 180° -DW there is a single equilibrium position ($\lambda = 90^\circ$) at which DW plane is perpendicular to plate plane. Decrease of way length of $\mathbf{M}$ turn for such DW is impossible, and at $\mathbf{M}$ turn in plate plane there are two hard magnetization axes on turn way. Therefore equilibrium position is determined by the minimal DW area at the mentioned orientation of its plane.

With p growth the general tendency of specific energy $\sigma / \sin \psi$ increase is remained for examined DW.

Depending on DW orientation their thickness δ (according to Lilley [12,13]) is determined by the following expression for 90° -DW:

$$\delta = 8 \sqrt{\frac{A}{|K_1|}} \left(\arccos \left(\frac{\sin \lambda}{\sqrt{(3 - \cos 2\lambda)/2}} \right) \sqrt{3 - \cos 2\lambda} \right) / (9 + 8p(3 + 2 \cos 2\lambda - \cos 4\lambda) - \\ - 4 \cos 2\lambda - 2 \cos 4\lambda - 4 \cos 6\lambda + \cos 8\lambda + \sqrt{2(5 + 4 \cos 2\lambda - \cos 4\lambda)}(\sin 2\lambda - 8p \sin 2\lambda - \\ - 4 \sin 4\lambda + 2 \sin 6\lambda))^{1/2},$$

and for 180° -DW:

$$\delta = \pi \sqrt{A/|K_1|} [(1 + 16p - 4 \cos 2\lambda - 16p \cos 2\lambda + 3 \cos 4\lambda)/32]^{1/2}.$$

For equilibrium 180° -DW orientation ($\lambda = 0$) the last expression becomes more simple: $\delta = 2\pi \sqrt{A/|K_1|} (1 + 4p)^{-1/2}$. General tendency of DW thickness decrease is kept with growth p for all examined DW.

5. Thus the plane Bloch 90° - 180° -DW can exist at presence of the sample strong demagnetization field in cubic (001)-crystals with a negative first magnetic anisotropy constant. Their structure does not depend on a direction of magnetization vector turn in DW volume. General tendencies of DW thickness and specific energy accordingly decrease and increase are kept with demagnetization field growth for all examined DW. The 180° -DW plane remains perpendicular to (001)-plane for arbitrary demagnetization field magnitude. 90° -DW plane orientation changes aspiring with demagnetization field growth to coincidence with crystal surface.

References

1. Hubert A., Shafer R. Magnetic domains. The analysis of magnetic microstructures. Berlin: Springer-Verlag, 1998.
2. Kandaurova G.S., Onoprienko L.G. Osnovnye voprosy teorii magnitnoj domennoj struktury. — Sverdlovsk: Izd-vo Sverdlovskogo Gosuniversiteta, 1986.

3. Onoprienko L.G. Raschet raspredelenija namagnichennosti v magnitoizotropnyh obrazcah proizvolnoj formy// FMM. – 1987. – Vol. 63. – №6. – p. 1096-1104.
4. Farztdinov M.M. Spinovye volny v ferro i antiferromagnetikah s domennoj strukturoj. Moskva: Nauka, 1988.
5. Vlasova N.I., Kandaurova G.S., Onoprienko L.G., Shhegoleva N.G. kooperativnyj domennye struktury v vysokoanizotropnyh splavah s dvojnikovoj mikrostrukturoj// UFN. – 1992. – Vol. 168. – № 5. – p. 161-198.
6. Filippov B.N., Korzunin L.G., Rebrjakova E.V. Domennye granicy v mnogoslojnyh plenках s ploskostnoj anizotropiej// FMM. – 1994. – Vol 78. – № 4. – p. 6-11.
7. Chizik A.B., Davidenko I.I., Maziewski A., Stupakiewicz A.// Phys. Rev. B. – 1998. – Vol. 57. – № 22. – p. 14366-14368.
8. Sohatsky V., Kovalenko V. // Journal de Physique IV. Colloque C1. Suppl. Journ. De Physique III. – 1996. – Vol. 7. – № 3. – p. C1-699 –C1-702.
9. Antonyuk O.A., Tychko A.V., Kovalenko V.F. Struktura blohovskoj domennoj granicy v kubicheskorn kristalle// PhTT. – 2004. – Vol. 46. – № 5. – p. 837-841.
10. Antonyuk O., Tychko A.V., Kovalenko V.F. The structure of bloch domain wall with equilibrium orientation// Alloys and Compounds. – 2004. – 369. – p.112-116.
11. Hubert A. Theorie der domanenwande in geordneten medien. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 1974.
12. Lilley B.A. Energies and width of domain boundaries in ferromagnetics //Phill. Mag. – 1950. – Vol.41. – № 319. – p.792-813.
13. O.A. Antonyuk, O.V. Tychko, Kovalenko V.F. 71°-domain wall in cubic crystal with photoinduced magnetic anisotropy//Functional materials – 2004. –Vol.11. – №3. – P.528-532.

Надійшла до редакції 15.03.2006

УДК 621.386.836; 622.383

Володимир В. Ільченко¹,
Олександр О. Буянін², Кирило Ю.
Панарін², Олег В. Третяк, Микола
В. Шкіль

**Дослідження впливу шару
квантових точок на вольт-
фарадну залежність контакту
метал-напівпровідник**

Проведено моделювання вольт-фарадних характеристик для контакту метал-напівпровідник з вбудованим шаром квантових точок. Було побудовано фізичну модель структури, яка дозволяє пояснити причину виникнення негативної диференціальної ємності, що спостерігалась експериментально. Також досліджено вплив на цей ефект геометричних параметрів структури, температури та концентрації квантових точок.

Ключові слова: квантова точка, негативна диференціальна ємність, вольт-фарадна характеристика.

¹ E-mail: ilch@uninet.kiev.ua

² E-mail: kirill_2004@mail.ru

³ E-mail: buyanin@univ.kiev.ua

Volodymir V. Ilchenko¹, Alexander
A. Buyanin, Kirill Y. Panarin, Oleg
V. Tretyak, Mikola V. Shkil

**The investigation of the quantum
dots layer influence on
capacitance-voltage dependence of
metal-semiconductor contact**

Modeling of capacitance-voltage characteristics for metal-semiconductor contact with quantum dots layer has been carried out. Physical model of structure, which can explain the cause of the negative differential capacitance appearance having been observed experimentally, was created. Influence of the geometrical parameters of the structure, temperature and concentration of QD on this effect has been investigated too.

Key words: quantum dot(QD), negative differential capacitance, capacitance-voltage characteristic.

The presence of the region of negative differential capacity (NDC), which is characterized for capacitance-voltage characteristic of Shottki diode with embedded quantum dots (QD) layer, is specific exactly for such semiconductor heterostructure. Therefore, this effect evokes a great interest of present-day scientists, because it gives a possibility to construct semiconductor devices with fundamentally new properties in the nearest future.

The group of scientists tried to obtain this effect explanation in the work [1]. But, physical model that enables technologists to construct structures with QD with given properties, wasn't created at present day.

The aim of this work is to construct and obtain numerical simulation of the Shottki diode with embedded QD layer physical model.

Let's consider the contact between metal and semiconductor [7] embedded with QD layer at distance of L_{dot} from contact (fig.1), the width of which is disregarded to simplify our task.



Fig.1. Metal-semiconductor contact with embedded QD layer

The Poisson's equation and boundary conditions, for this structure are:

- a) voltage potential, on the edge of space-charge region (SCR), is equal to zero:

$$\varphi(w) = 0 \quad (1)$$

- b) field on the edge of SCR is no contact:

$$\left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=w} = 0, \quad (2)$$

where w is a width of SCR.

The following equations set was obtained:

$$\begin{cases} \frac{d^2 \varphi}{dx^2} = -\frac{eN_{cv}}{\epsilon\epsilon_0} + \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0} \delta(x - L_{dot}) \\ \varphi(w) = 0 \\ \left. \frac{d\varphi}{dx} \right|_{x=w} = 0 \end{cases} \quad (3)$$

The charge density, in right-hand member of Poisson's equation, consists of two components: a charge density of ionized impurity (bear in mind that we have n-type semiconductor and so the charge of ionized donor impurity is positive), which is constant in semiconductor volume (uniformly doped semiconductor):

$$-\frac{eN_{cv}}{\epsilon\epsilon_0} \quad (4)$$

and a charge density of states in QD. These states originate from difference in band width and work functions of semiconductors that bring to appearance of space quantization and point spectrum in QD. The main fact is that these states are localized in space, i.e. charges can exist only in a given place of space with a special given energy.

Thus the charge density in dots is:

$$\frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}\delta(x-L_{dot}), \quad (5)$$

where n_{dot} is a surface charge density and Dirac delta-function has dimension (1/cm).

Solving obtained equations set (3) we obtain the following solution:

$$\frac{d\varphi}{dx} = -\frac{eN_{cv}}{\epsilon\epsilon_0}x + \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}\theta(x-L_{dot}) + C_1, \quad (6)$$

$$\varphi(x) = -\frac{eN_{cv}}{2\epsilon\epsilon_0}(x-w)^2 + \begin{cases} 0, x < L_{dot} \\ \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(x-L_{dot}), x > L_{dot} \end{cases} + C_2(x-w) + C_3, \quad (7)$$

$$\varphi(w) = 0 \Rightarrow C_3 = \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(L_{dot}-w), \quad (8)$$

$$\left.\frac{d\varphi}{dx}\right|_{x=w} = 0 \Rightarrow \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0} + C_2 = 0 \Rightarrow C_2 = -\frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}. \quad (9)$$

The following solution of equations set was obtained (1):

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= -\frac{eN_{cv}}{2\epsilon\epsilon_0}(x-w)^2 + \begin{cases} 0, x < L_{dot} \\ \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(x-L_{dot}), x > L_{dot} \end{cases} + \\ &+ \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(w-x) + \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(L_{dot}-w) = \\ &= -\frac{eN_{cv}}{2\epsilon\epsilon_0}(x-w)^2 + \begin{cases} 0, x < L_{dot} \\ \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(x-L_{dot}), x > L_{dot} \end{cases} + \\ &+ \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}(L_{dot}-x) \end{aligned} \quad (10)$$

Thus, voltage potential distribution in SCR was obtained (fig.2).

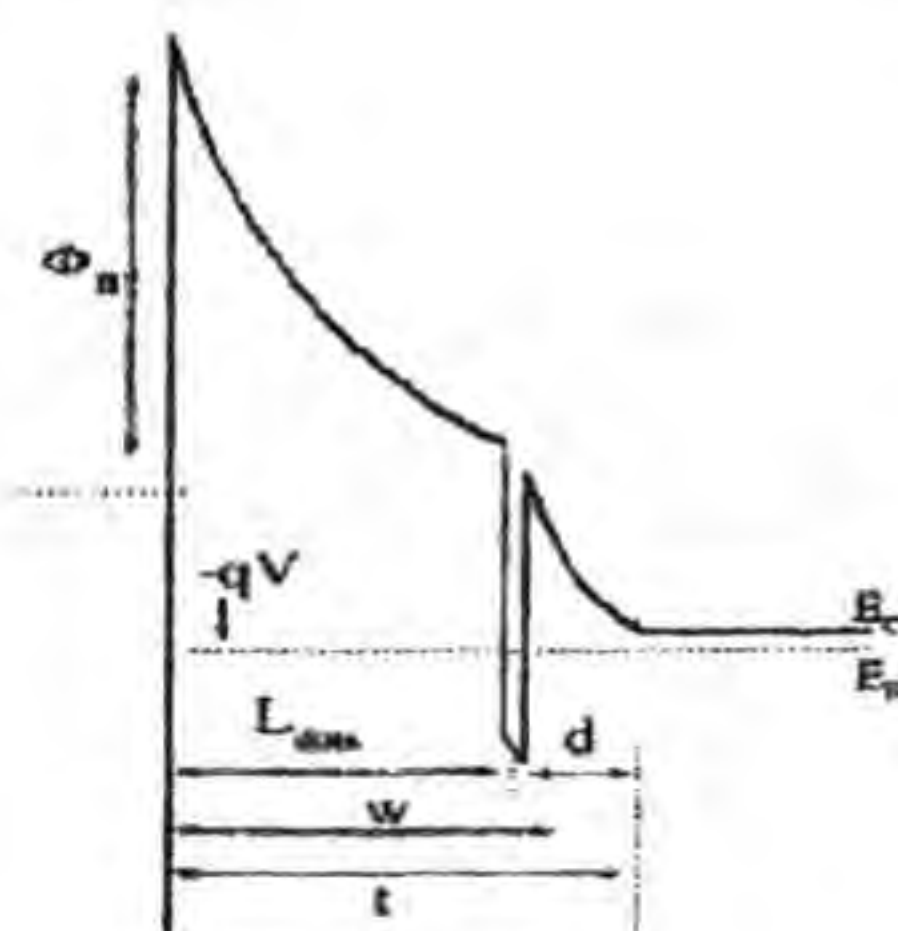


Fig. 2. Voltage potential distribution in SCR

Under the great reverse voltage applied in contact, Fermi level E_F would be located lower than energetic level in QD E_{dot} . Therefore, states in dots would be free of charge, i.e. $n_{dot} = 0$ and formula (10) would tend to be classical [7]. Then applied reverse voltage is decreasing, Fermi level E_F would be approaching to level E_{dot} that would lead to infilling of additional states in dots, therefore, n_{dot} would be increasing in compliance with Fermi-Dirac statistic:

$$n_{dot}(V_{dot}) = N_{dot} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{dot} - eV_{dot}}{kT}\right)}, \quad (11)$$

where N_{dot} is a surface density of QD (assume for simplification that only one electron could be contents in each dot); V_{dot} is a voltage potential on distance L_{dot} from the edge of contact that could be obtained if $x = L_{dot}$ is substituted in (10):

$$V_{dot} = \varphi(L_{dot}) = -\frac{eN_{cv}}{2\epsilon\epsilon_0}(L_{dot} - w)^2 \quad (12)$$

Find voltage dropped in all SCR. For $x = 0$ in (10) we obtained:

$$-\Phi_B + V = -\frac{eN_{cv}}{2\epsilon\epsilon_0}w^2 + \frac{en_{dot}}{\epsilon\epsilon_0}L_{dot} \quad (13)$$

$$\varphi(0) = -\Phi_B + V \quad (14)$$

Actually, while measuring capacitance-voltage characteristic, we assign voltage on contact V . Thus, voltage V as a parameter that defines SCR width is done in (13), changing of which depending on voltage, gives us barrier capacity

value C_{bulk} . It is determined by changing quantity of charged impurity in SCR (later – bulk barrier capacity):

$$C_{BULK} = \frac{\epsilon\epsilon_0}{w} \quad (15)$$

It is necessary to take into consideration that in formula (13), we have n_{dot} , that due to (12), depends on width of SCR w too. Thus, to obtain equation that indirectly defines dependence $w = w(V)$, place (12) in (13) and find:

$$w^2 - \frac{2\epsilon\epsilon_0}{eN_{CV}}(\Phi_B - V) + \frac{2N_{dot}}{N_{CV}} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_{dot} - \frac{e^2 N_{CV}}{2\epsilon\epsilon_0}(L_{dot} - w)^2}{kT}\right)} L_{dot} = 0 \quad (16)$$

Direct dependence obtaining $w = w(V)$ with analytical elementary functions in general case is impossible, but numerical solution algorithm of equation (16) is quite easy to realize and it was done in this work. Straight away, we must note that additional charges in QD could give visible influence on bulk barrier capacity only with high concentrations of QD, but NDC explanation, that is experimentally observed, is impossible, because, with NDC presence in (16), for two identical values of SCR width w must correspond to different values of voltage on contact V .

The analysis of formuli (16), (12), (11) shows that voltage changing on contact leads to charges changing in QD n_{dot} . This means that the presence of additional capacity, which is conditioned by the capturing possibility carriers on levels in QD, that also is barrier capacity (point barrier capacity). From this it follows that charge changing mechanism in volume of semiconductor and in QD gives us the opportunity to conclude that these capacities are joined in parallel. Thus, to calculate capacitance-voltage characteristic of such contact with QD, it is necessary to add to C_{bulk} point barrier capacity C_{dot} , according to the definition of capacity, is equal to:

$$C_{dot} = e \frac{dn_{dot}}{dV} \quad (17)$$

The whole capacity of contact is: $C = C_{bulk} + C_{dot}$.

For the dependence construction $C = C(V)$ (capacitance-voltage characteristic), it is necessary to solve equation (16) for definite discrete sets of voltage V and find the SCR width w . If we know the SCR width, we can find, in accordance to (15), the bulk barrier capacity C_{bulk} . After that, using formuli (11) and (12), we find n_{dot} . As a result, we obtain $n_{dot} = n_{dot}(V)$ dependence, using

which, from (17) one can find C_{dot} . Arranging these two capacities together, we obtain capacitance-voltage characteristic of the given structure.

This algorithm was realized in the following way:

1) We set certain $N_{dot}, L_{dot}, E_{dot}, N_{cv}$ values and fix certain voltage values V (if you do this step for the first time, then voltage value correspond to the left boundary of given bias range).

2) Equation (16) is solved by bisection method and SCR width w is obtained. ОПЗ w . Then we have SCR width, we find bulk barrier capacity value $C_{bulk}(V)$ by formula (15). In the absence thereof QD layer repeating steps (1) and (2) we obtain well known Shottki diode C-V characteristic for given range.

3) Then we already had calculated SCR width value w , using formula (12), we obtain voltage potential value V_{dot} in the area with QD, which will determine the population of additional QD energy levels. It is need to consider that additional charge in QD deforms potential barrier profile in the general case (then we have great QD concentrations). They ??? voltage potential value in the area with QD in such a way that QD charge concentration satisfies Poisson's equation solution at the same time, giving necessary potential barrier value, which is determined only by work functions difference in metal and semiconductor (it is considered by substitution of (11) and (12) in (13)).

4) From (11) we find $n_{dot}(V)$, i.e. total charge value in QD under a given voltage V .

5) Then we do finite increment of voltage ΔV and after that, repeating steps 1 – 4, we obtain $n_{dot}(V + \Delta V)$, i.e. total charge value in QD under voltage $V + \Delta V$.

6) Using capacity definition $C = e \frac{dn_{dot}}{dV}$ and changing formula with infinitesimal increments on formula with finite increments $C = e \frac{n_{dot}(V + \Delta V) - n_{dot}(V)}{\Delta V}$, we find additional capacity value $C_{dot}(V)$, which correspond to QD.

7) After that we find $C_{dot}(V)$ and $C_{bulk}(V)$ sum, and obtain total capacity value of the structure.

8) If the voltage value correspond to our given range (which we specify at the beginning of the calculation), then we increase it on ΔV and proceed to step 1. In the other case, we already had C-V characteristic of the structure $C(V)$.

This algorithm was realized and the obtained results show that in some range of parameters there is a region on C-V characteristic, which has NDC.

To confirm obtained results, sets of C-V characteristics for different concentrations and temperatures were shown in fig.3 and fig.4.

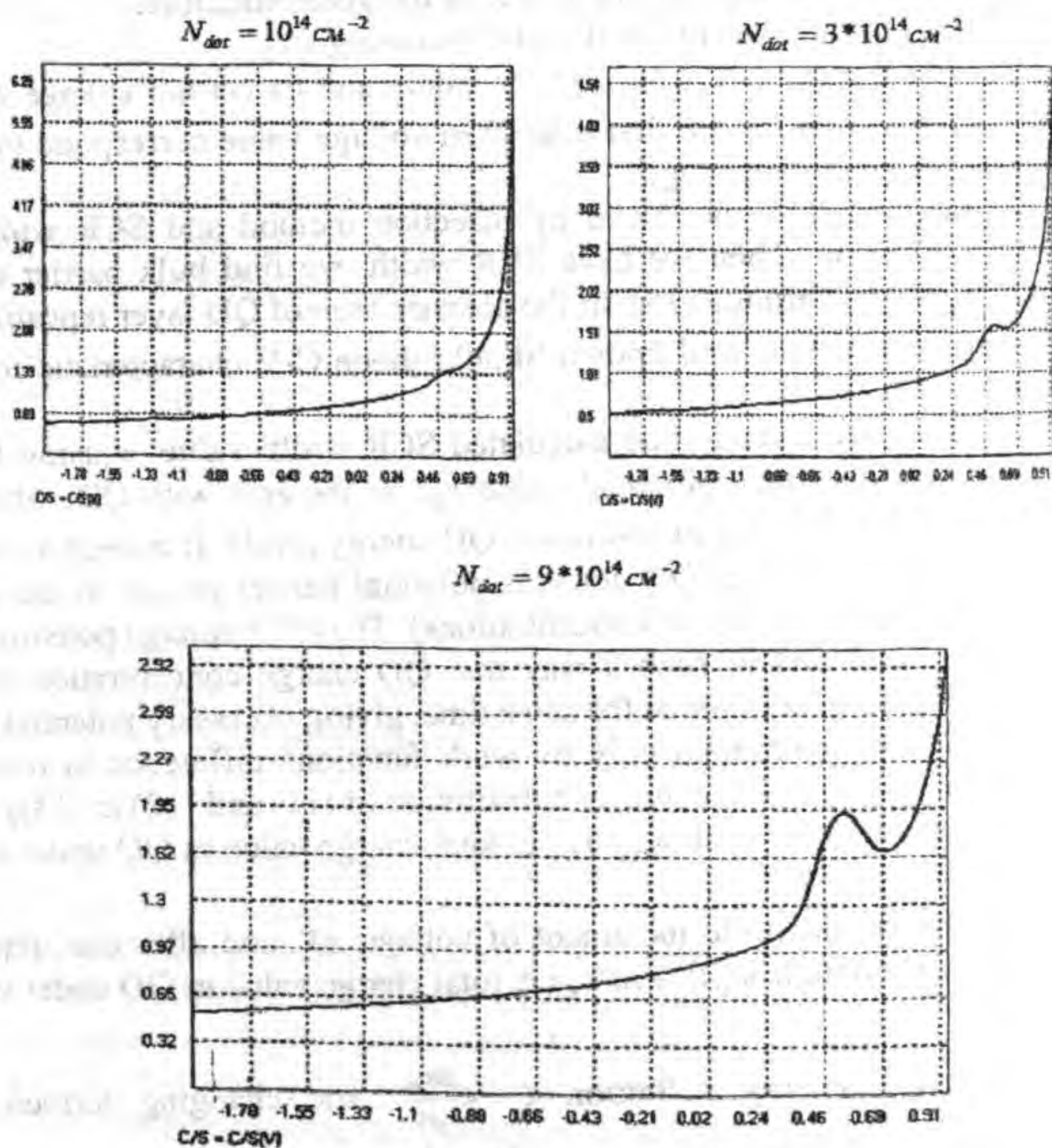


Fig.3 .Sets of C-V-characteristics for structures with different concentrations of QD (you can see that increasing of concentration of QD intensify the effect)

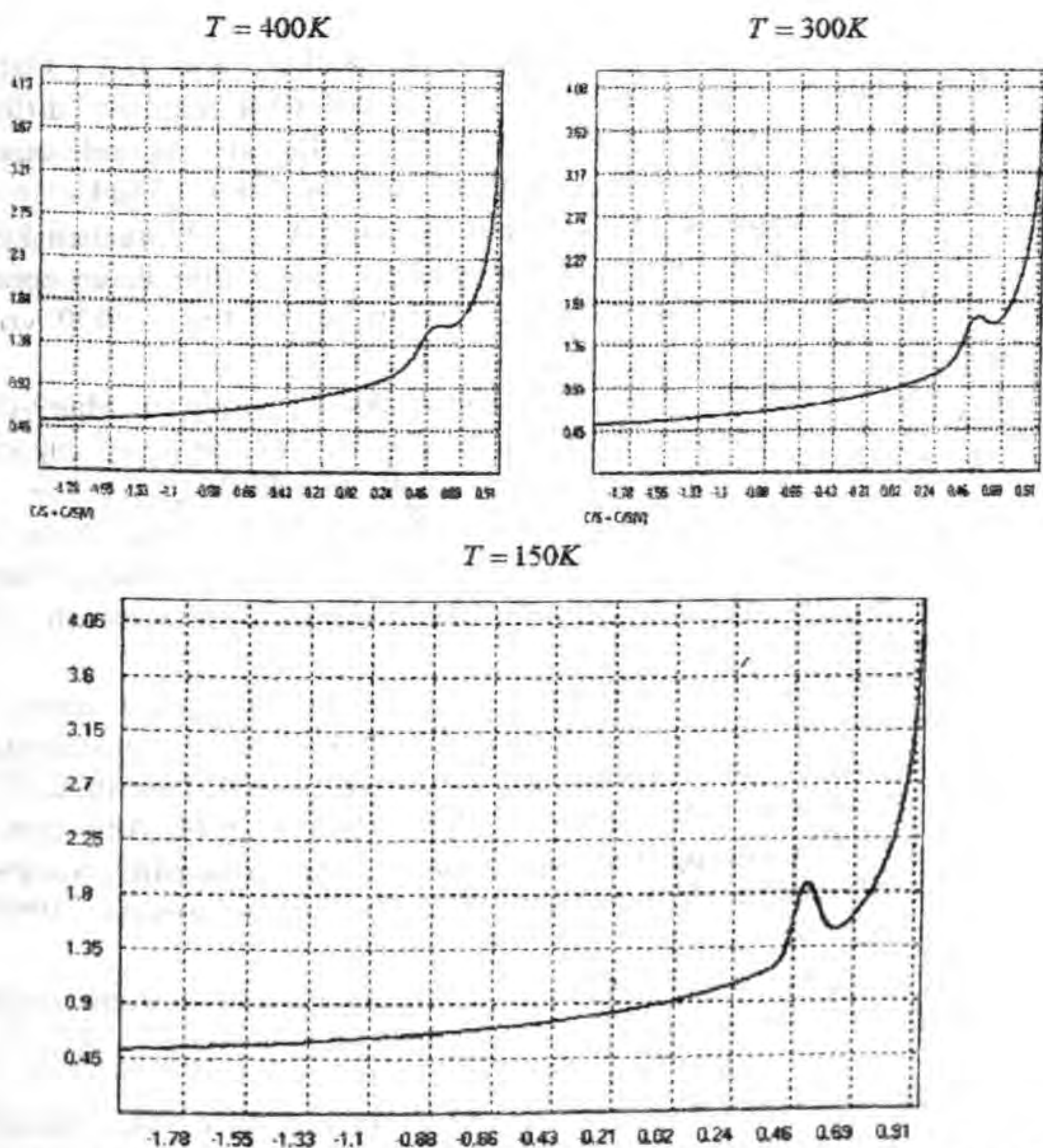


Fig.4 . Sets of C-V-characteristics for structures at different temperatures (you can see that decreasing of temperature intensify the effect)

As a result of the work, qualitative analysis of obtained C-V-characteristics dependence on such parameters, as temperature and concentration of QD has been carried out. Analysis showed temperature decreasing and concentration of QD increasing leads to increasing of NDC effect.

Literature

1. A. J. Chiquito, Yu. A. Pusep, S. Mergulhao, and J. C. Galzerani. Capacitance-voltage profile in a structure with negative differential capacitance caused by the presence of InAs/GaAs self-assembled quantum dots. // *Phys. Rev.*, - 2000, vol. 61, - p. 5499 – 5504.
2. O.P. Pchelyakov, Yu.B. Bolkhovityanov, A.V. Dvurechenskii, A.I. Nikiforov, A.I. Yakimov, B. Voigtlander. Molecular beam epitaxy of silicon-germanium nanostructures. // *Thin Solid Films*, - 2000, vol. 367, - p. 75 – 84.
3. C. M. A. Kapteyn, M. Lion, R. Heitz, and D. Bimberg. Many-particle effects in Ge quantum dots investigated by time-resolved capacitance spectroscopy. // *Appl. Phys. Lett.*, - 2000, Vol. 77(25), - p. 4169 – 4171.
4. W.R. Jiang, Jie Qin, D.Z. Hu, H. Xiong, Z.M. Jiang. A two-stage molecular beam epitaxial growth method to fabricate small and uniform Ge quantum dots on Si(1 0 0). // *Journal of Crystal Growth*, - 2001, vol.227, p. 1106 – 1110.
5. В.А. Егоров, Г.Э. Цыглин, А.А. Тонких, Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов и др. Si/Ge наноструктуры для применения в оптоэлектронике. // *Физика твердого тела*, - 2004, том 46, с. 53 – 59.
6. Н.Н. Леденцов, В.М. Устинов, В.А. Шукин, Ж.И. Алферов, П.С. Копьев. Гетероструктуры с квантовыми точками: получение, свойства, лазеры. // *Физика и техника полупроводников*, - 1998, том 32, с. 385 – 410.
7. Л.С. Берман, А.А. Лебедев. Емностная спектроскопия глубоких центров в полупроводниках. – Ленинград, «Наука», - 1981, - с. 16 – 64.
8. 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 редколегії 31.03.2006

УДК 537.635

Михайло В. Кононов,
Андрій В. Нетреба,
Олег О. Нагуляк

**Вплив немонохроматичності
випромінювання на
реконструкцію томограм у
проективній томографії**

На основі проведення числового математичного моделювання запропонована методика оцінки залежності якості реконструкції від частотних характеристик джерела випромінювання. Кількісні оцінки параметрів спектра випромінювання проведені у відповідності до фактичних характеристик біологічних тканин і медичного обладнання. Визначені граничні для якості реконструкції параметри спектра.

Ключові слова: реконструкція, поглинання, спектр випромінювання, томографія.

Mykhailo V. Kononov,
Andriy V. Netroba,
Oleg O. Nagulyak

**Influence of radiation non-
monochromatic to tomogram
reconstruction in CT**

The method of image quality dependence estimation on frequency parameters of emission source is proposed on the base of numerical simulation. The quantitative evaluations of the parameters of radiation spectrum are conducted in accordance to the actual characteristics of biological tissues and medical equipments. Marginal spectrum parameters for reconstruction quality are determined.

Key Words: reconstruction, absorption, radiation spectrum, tomography.

E-mail: oan@univ.kiev.ua, avn@univ.kiev.ua

Проективна томографія є одним із сучасних засобів дослідження внутрішніх структур біологічних об'єктів, який не потребує порушення цілісності досліджуваних тканин. Точність томографічних методів діагностики залежить від багатьох груп факторів, основними серед яких є особливості приладової частини томографа, характеристики методів обробки сигналів та реконструкції томограм, спектральні властивості взаємодії випромінювання з біологічними об'єктами. Реконструкція томограм методами проективної томографії базується на відновленні просторового розподілу коефіцієнта поглинання рентгенівського випромінювання біологічними тканинами [1-3]. Стаття присвячена дослідженню впливу характеристик спектра на якість реконструкції, оскільки така проблематика залишається актуальною і сьогодні [4]. Відомі різні підходи до вирішення зворотних задач, пов'язаних з відновленням просторово розподілених характеристик з урахуванням немонохроматичності. Часто з метою коректного врахування спектральних параметрів проводять реконструкцію томограм, використовуючи

заздалегідь обраховані поправочні коефіцієнти. Відновлення томограм при використанні низьких та високих енергій квантів розглянуто в роботі [5], де головну увагу акцентовано на нелінійному характері залежності коефіцієнтів поглинання випромінювання біологічними тканинами від енергії квантів.

Вхідними параметрами зворотної задачі визначення досліджуваних характеристик є значення виміряних інтенсивностей рентгенівських променів, які пройшли через об'єкт та частково при цьому поглинулися. Таким чином, форма частотного спектра пучка випромінювання і частотна залежність коефіцієнтів поглинання визначають характеристики сигналу, який вимірюється приймальною системою проективного томографа [4]. У роботі, шляхом проведення математичного числового моделювання процесів генерації випромінювання, його взаємодії з речовиною та подальшою обробкою виміряних сигналів, досліджений вплив спектральних характеристик випромінювання на якість реконструкції томограм.

Методика числового моделювання

Загальна схема вивчення залежності якості реконструкції томограм методом згортки та зворотного проєціювання від характеристик спектра випромінювання включає декілька послідовних етапів:

1. Формування масивів виміряних даних інтенсивності випромінювання, яке пройшло через біологічний об'єкт. Для реалізації даного завдання було проведене моделювання реєстрації проєкційних даних, при якому в якості об'єкта використовувались звичайні томографічні зображення. При числовій імітації процесів ослаблення випромінювання при його взаємодії з речовиною враховувалась частотна неоднорідність коефіцієнта поглинання.
2. Реконструкція томограми за методом згортки та зворотного проєціювання, при якій побудовані томограми розмірністю 512x512 пікселів.
3. Визначення якості реконструйованої томограми шляхом її поелементного порівняння з початковим зображенням, яке використовувалось при проведенні робіт на першому етапі числового моделювання проєкційних даних.

Алгоритм моделювання спектральної залежності коефіцієнта поглинання біологічних тканин

Для реалізації моделювання взаємодії випромінювання заданих спектральних характеристик з біологічними тканинами запропоновано використання дискретизації за частотою рентгенівських квантів при їх розповсюдженні у середовищі. Моделювання немонохроматичності випромінювання проводилося шляхом застосування сукупності

дискретних значень коефіцієнтів поглинання, які відповідають частотам штучно дискретизованого спектра. Згідно викладеного підходу до побудови моделі спектра, сканування ослабленого при проходженні через об'єкт випромінювання проводилось на семи частотах. За таких умов, прийнятий детектором сигнал можна задати виразом:

$$P_{\Sigma} = \sum_{i=1}^N a_i P(\nu_i) / \sum_{i=1}^N a_i \quad (1)$$

де $P(\nu_i)$ - інтенсивність рентгенівського пучка з частотою ν_i , a_i - нормовані вагові коефіцієнти, які визначають внесок інтенсивності відповідного пучка у загальний сигнал, $N=7$. При проведенні числового моделювання використовувався набір спектральних компонент, огинаючою до якого є гаусова крива, для якої частота ν_3 відповідає максимуму, а співвідношення вагових коефіцієнтів визначає ширину контуру. Відповідно до значень частот ν_i були поставлені коефіцієнти поглинання рентгенівського випромінювання біологічними тканинами μ_i . Максимум спектрального розподілу, при цьому, був вибраний на рівні частоти ν_0 , що відповідає енергії рентгенівських квантів на рівні 60 кеВ, яка є типовою для сучасних діагностичних систем. Значення частот пучків було вибрано згідно виразу $\nu_i = k_i \nu_0$, де k_i - коефіцієнти масштабування за частотою.

Реконструкція просторового розподілу коефіцієнта поглинання випромінювання за методом згортки і зворотного проєціювання [1] полягає у знаходженні проєкційної суми для кожного пікселя відновленої томограми:

$$F_A(k \cdot \Delta x, l \cdot \Delta y) \approx \Delta \theta \sum_{n=1}^N \tilde{P}_i(k \cdot \Delta x \cdot \cos \theta_n + l \cdot \Delta y \cdot \sin \theta_n, \theta_n), \quad (2)$$

$$\text{де } \tilde{P}_i(S', \theta_n) = \Delta S \sum_{m'=M^-}^{M^+} \tilde{P}_c(m' \cdot \Delta S, \theta_n) \cdot I(S' - m' \cdot \Delta S),$$

$$P_c(m' \cdot \Delta S, \theta_n) = \Delta S \cdot \sum_{m=M^-}^{M^+} P(m \cdot \Delta S, \theta_n) \cdot q((m' - m) \cdot \Delta S)$$

В останньому виразі величина $P(m \cdot \Delta S, \theta_n)$ визначається виразом (1), а параметри $m \cdot \Delta S, \theta_n$ відповідають за просторові координати геометричного розміщення скануючого пучка.

Кожна біологічна тканина характеризується власним розкидом коефіцієнта поглинання випромінювання, який у розглянутому випадку визначається формою спектра випромінювання. Розкид частот спектра і розкид значень коефіцієнтів поглинання певного класу тканин зручно подавати у нормованому відносно середнього значення вигляді:

$$\langle \mu \rangle = \frac{\sum \mu_i}{N}, \quad \langle \varepsilon_n \rangle = \frac{1}{N} \frac{\sum |\mu_i - \langle \mu \rangle|}{\langle \mu \rangle}$$

На основі характерних залежностей коефіцієнтів поглинання випромінювання різними біологічними тканинами від енергії рентгенівських квантів (рис. 1-2) були розраховані співвідношення розкидів коефіцієнтів поглинання при різних параметрах спектра гаусоподібної форми.

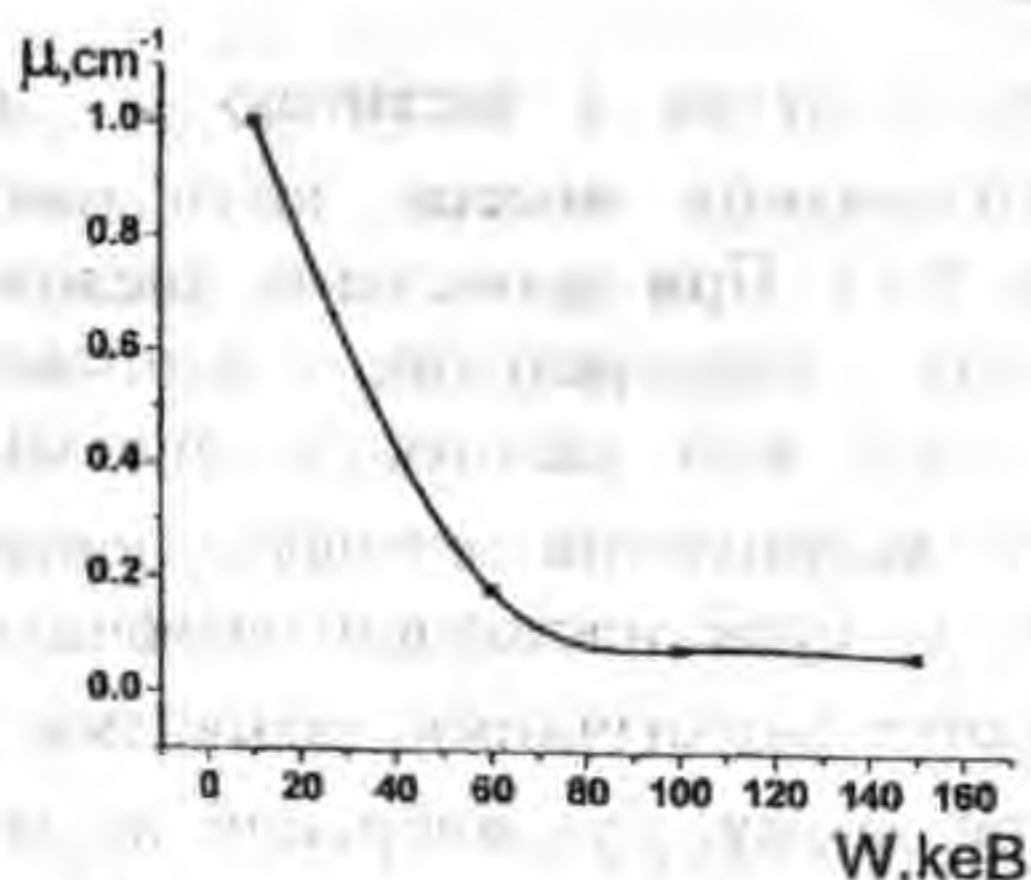


Рис.1. Спектральна залежність коефіцієнта поглинання випромінювання м'язовою тканиною

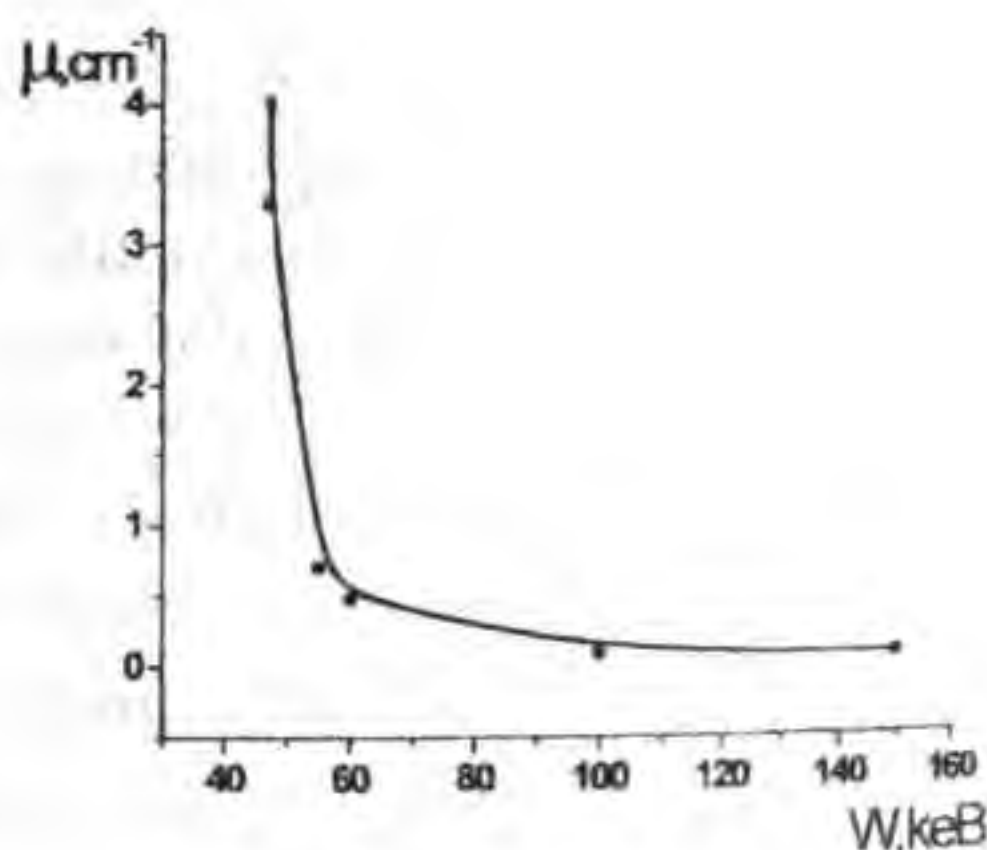


Рис.2. Спектральна залежність коефіцієнта поглинання випромінювання кістковою тканиною

Таблиця 1. Зміна коефіцієнта поглинання біологічними тканинами рентгенівського випромінювання при різних параметрах спектра.

$\mu, / < \mu >$	$< \epsilon_{\mu} >, \%$	$< \epsilon_{\omega} >, \%$ кісткова тканина	$< \epsilon_{\omega} >, \%$ м'язова тканина
0,85\0,9\0,95\1\1,05\1,1\1,5	8,6	1,7	3,3
0,7\0,8\0,9\1\1,1\1,2\1,3	17,1	3	7
0,4\0,6\0,8\1\1,2\1,4\1,6	34,3	7	13
0,1\0,2\0,3\1\1,7\1,8\1,9	68,6	10,2	20,1
0,05\0,1\0,15\1\1,85\1,9\1,95	77,1	11,7	21,6

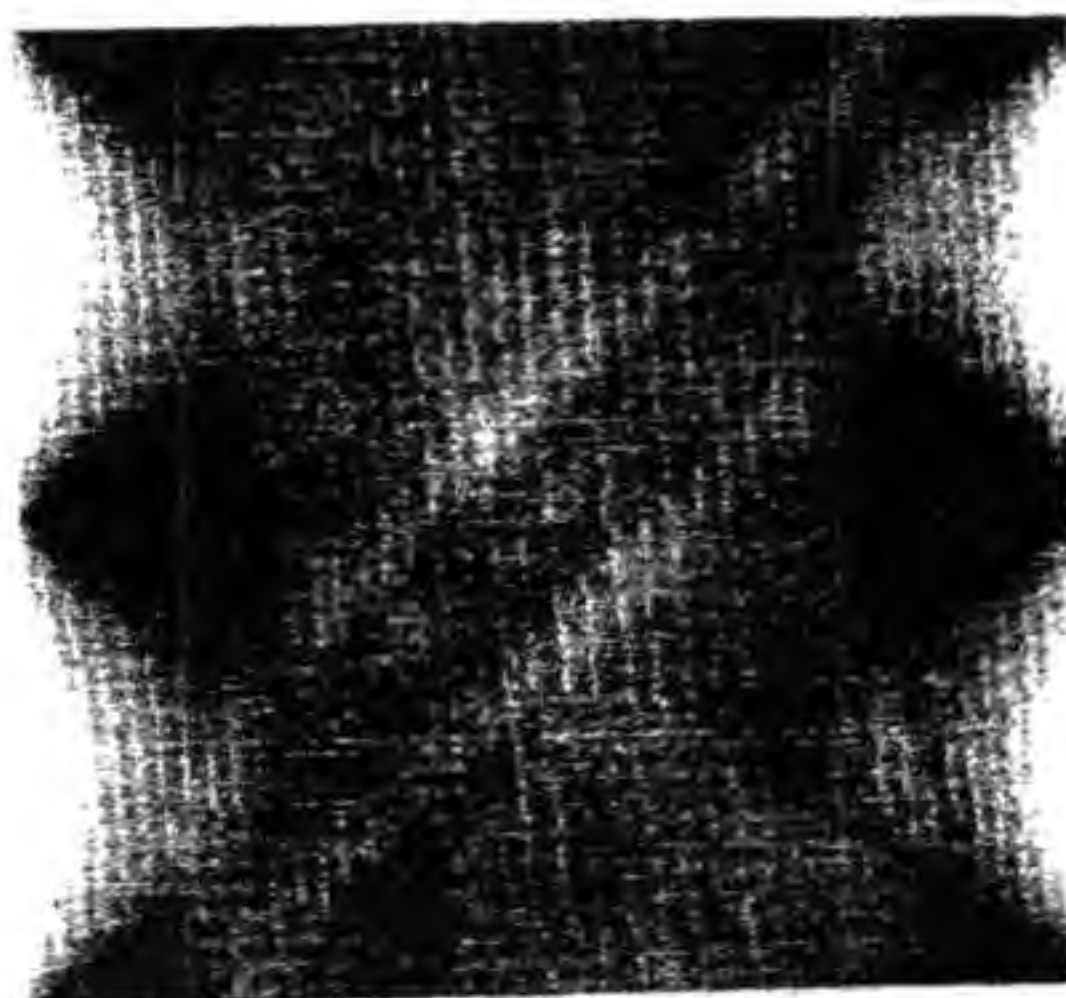
Кількісний аналіз точності реконструкції

Для сукупності спектральних розподілів, які визначаються перерахованими в табл. 1 значеннями, отримані повні набори проекційних даних, за якими відновлені матриці просторових розподілів коефіцієнта поглинання випромінювання. Для отримання проекційних даних було використане томографічне зображення, яке містить фрагменти, що відповідають тканинам різного типу (рис. 3). Після повної реконструкції з урахуванням немонохроматичності (рис.4) точність відновлення оцінена

методом поелементного порівняння відновлених томограм для двох класів спектра.

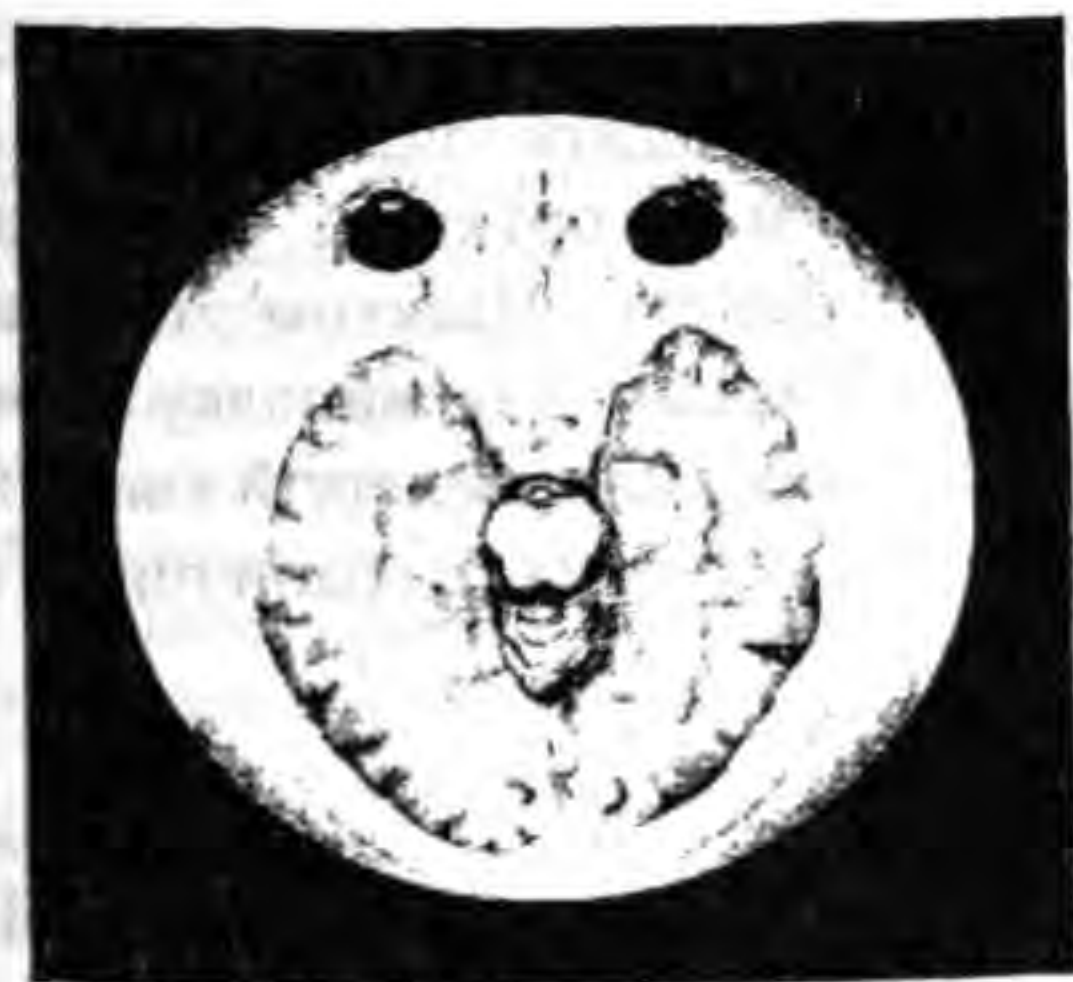


а



б

Рис.3. Реконструкція за умов використання монохроматичного пучка з енергією квантів 60 кеВ (а- томограма, б – проекційні дані).



а



б

Рис.4. Реконструкція за умов застосування немонохроматичного пучка з граничним розкидом частот (а- томограма, б – проекційні дані).

Одним із застосованих числових критеріїв подібності двох масивів даних є коефіцієнт кореляції. Даний параметр був обрахований окремо для випадків відновлення характеристик кісткових тканин, та окремо – м'язових (рис. 5-6). Умовний поділ тканин, принаймні на два класи, дозволить оптимально виконати попереднє планування точності дослідження з урахуванням його специфіки.

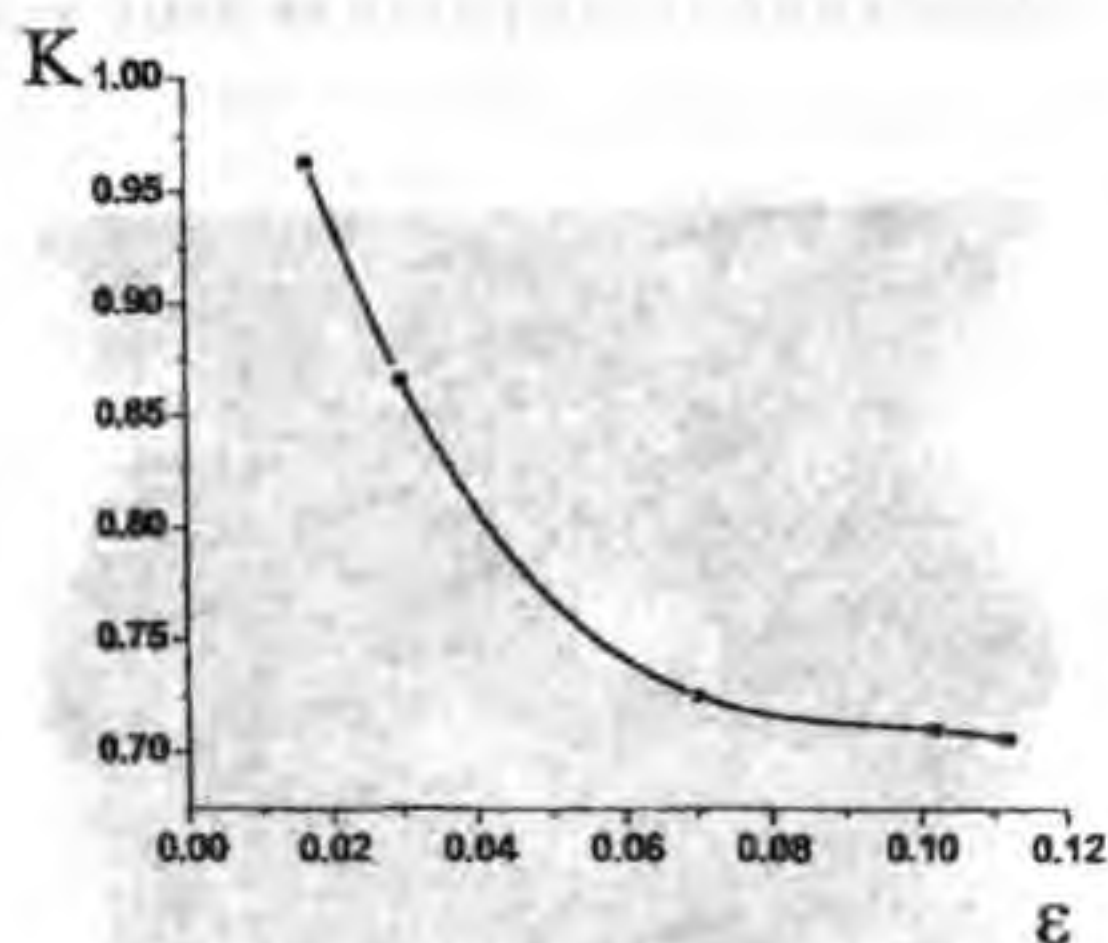


Рис. 5. Спектральна залежність коефіцієнта кореляції характеристик кісткової тканини, відновлених при використанні двох класів спектра

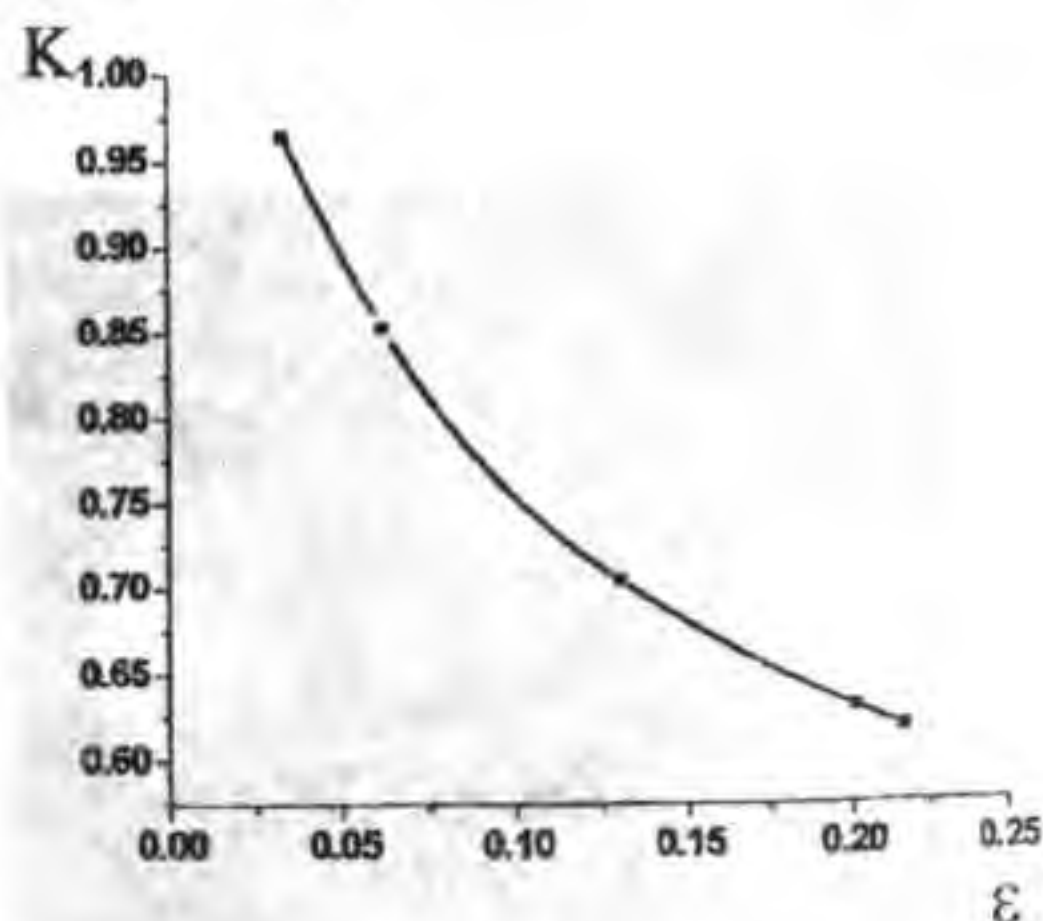


Рис. 6. Спектральна залежність коефіцієнта кореляції характеристик м'язової тканини, відновлених при використанні двох класів спектра

Висновки

Застосована фізична модель взаємодії сукупності рентгенівських пучків з біологічними тканинами дозволяє проводити оцінку залежності якості реконструкції томограм за методом згортки і зворотного проєціювання від параметрів частотного спектра. Шляхом числового моделювання одержано реконструйовані томограми для випадку різного рівня розкиду енергій квантів. Показано, що відхилення енергій квантів на рівні 11,7% для кісткових тканин та 21,6% для м'язових, є граничними при застосуванні вказаного методу реконструкції.

Література

1. Robert M. Lewitt Reconstruction Algorithms: Transform methods // IEEE. - 1993. - Vol. 71, № 3. - P. 125-147.
2. Sasov A. Comparison of fan-beam, cone-beam and spiral scan reconstruction for X-ray micro-CT // Proc. SPIE Conference on Physics of Medical Imaging. - San Diego (Calif., USA), 2001. - Vol. 4320. - P. 711-718.
3. Хермен Г. Восстановление изображений по проекциям: Основы реконструктивной томографии. - М.: Мир, 1983.
4. Albert Macovski Physical Problems of Computerized Tomography // IEEE. - 1993. - Vol. 71, №3.
5. Polad M Shikhaliev Beam hardening artefacts in computed tomography with photon counting, charge integrating and energy weighting detectors: a simulation study // Phys. Med. Biol. - 2005. - Vol. 50. - P. 5813-5827.

Надійшла до редакції 10.03.2006

УДК 535.375+621.378.335

Микола Корнієнко,
Валерій Григорук,
Олександр Корнієнко,
Тетяна Вебла

Про природу глибоких «провалів» в інфрачервоних спектрах поглинання

В смугі поглинання внутрішніх груп ОН в плавленому кварці виявлено глибокі «провали» на частотах колиально-обертальних ліній в спектрі поглинання атмосферної вологи. Встановлено, що їх природа пов'язана з резонансною передачею збудження від кварцу до газоподібних молекул H_2O і їх вимушеним випромінюванням. Вперше реалізовано лазерні переходи на ряді довжин хвиль в області 2,7-2,8 мкм для найбільш поширених речовин в природі (води і SiO_2). Явище пов'язане з колективною природою коливальних збуджень системи гідроксильних груп. Пропонується використовувати явище для дистанційного вимірювання температури твердих тіл.

Ключові слова: ОН групи, плавлений кварц, смуга поглинання, лазерний перехід.

Mykola Korniyenko,
Valery Grygoruk,
Oleksandr Korniyenko,
Tetyana Vebla

About nature of the deep "notches" in infrared absorption spectra

In an absorption band of internal OH groups in fused quartz the deep "notches" at frequencies of vibratory-rotary spectrum absorption lines of atmospheric moisture are found out. It is established, that their nature is connected with resonant transfer of excitation from quartz to gaseous molecules H_2O and their stimulated radiation. For the first time the laser transitions on series wave lengths in the field of 2,7 -2,8 μm for the most widespread substances in the nature (water and SiO_2) are realized. The phenomenon is connected with collective nature of vibration excitations of hydrogen groups system. It is offered to use the phenomenon for remote temperature taking of solids.

Key Words: OH groups, fused quartz, absorption band, laser transition.

*E-mail: nikkorn@mail.univ.kiev.ua; grygoruk@mail.univ.kiev.ua

Вступ

При дослідженні інфрачервоних (ІЧ) спектрів поглинання часто спостерігаються некомпенсовані вузькі лінії парів H_2O і CO_2 навіть при використанні сучасних двоканальних дифракційних спектрометрів і фур'є-спектрометрів. Причому колиально-обертальні лінії молекул могли проявлятися як в позитивній, так і в негативній полярності, тобто на цих частотах прозорість досліджуваних зразків могла як зменшуватись, так і зростати. На нетривіальність цього явища вказує одночасне спостереження ліній одних і тих же газів у різних полярностях, бо не можуть, наприклад, пари H_2O бути в каналі зразка і в надлишку, коли спостерігаються додаткові лінії поглинання, і в недостатці, коли проявляються лінії

позитивної полярності в спектрі $T(\nu)$. Це тривалий час залишалося незрозумілим і не досліджувалось належним чином. Для зменшення негативного впливу цього явища на якість коливальних спектрів використовується вакуумування камер з дослідними зразками або наповнення їх азотом. Особливо чітко це явище проявилось при дослідженні нами спектрів поглинання внутрішніх гідроксильних груп OH у плавленому кварці. В смузі поглинання груп OH ν_{OH} в області 3400-3800 см^{-1} спостерігалися глибокі «провали», тобто вузькі лінії від'ємної полярності, аналогічні лініям оберненого комбінаційного розсіяння в антистоксовій області [1]. Дослідженню природи цього загального явища на прикладі поглинання груп OH в SiO_2 і присвячена дана робота.

Актуальність роботи визначається її фундаментальним і практичним значеннями. Це зумовлено широким розповсюдженням SiO_2 і H_2O в природі. Зокрема в земній корі міститься близько 58% силікатів, причому 12% у виді кварцу. Загальне число мінералів, які містять оксиди кремнію (кремнезем) перевищує 400 [2,3], тому силікати протягом всієї історії складали значну частину промислової продукції. Зокрема, сьогодні виробництво кремнію, що є основою напівпровідникових приладів, базується на переробці кварцу [4]. Слід відзначити, що завдяки широкому впровадженню персональних комп'ютерів, мобільного зв'язку і сітки Інтернет, об'єм продажу виробів на основі Si більший, ніж в автомобільній промисловості.

Не менше значення взаємодія води і силікатів має для будівельної промисловості і технології в'яжучих речовин, розповсюдження води в ґрунтах і частинах рослин, що важливо для землеробства і багатьох технологічних процесів. Слід відмітити також застосування SiO_2 у волоконній оптиці [5,6]. І тут взаємодія води та SiO_2 має важливе значення. Максимальне пропускання волоконних світловодів в області біля 1,5 мкм у значній мірі обмежується наявністю в плавленому кварці гідроксильних груп OH, так як у цій області знаходиться смуга поглинання обертону $2\nu_{OH}$. Розкриття фізичної природи досліджуваного явища дозволяє розглядати його не як негативний фактор у спектроскопії, як це було до теперішнього часу, а використовувати для отримання додаткової інформації про речовину та інших практичних цілей. Зокрема, в цій роботі показано, що з використанням взаємодії H_2O і SiO_2 може бути створений новий лазер в області 2,7-2,8 мкм.

1. Спостереження глибоких «провалів» у смузі поглинання гідроксильних груп плавленого кварцу

Згідно довідковим даним [7, т.1], у плавленому кварці може бути до 0,2 мол% гідроксильних груп. Для стекол системи $\text{SiO}_2\text{-Me}_2\text{O}$ ($\text{Me}=\text{Li}, \text{Na}$) вміст води зростає до 0,5 мол% зі збільшенням концентрації $\text{C}(\text{Me}_2\text{O})$, а для системи $\text{P}_2\text{O}_5\text{-ZnO}$ концентрація води може досягати 30 мол% при

$\text{C}(\text{ZnO}) \sim 30$ мол%, хоча і зменшується при підвищенні концентрації ZnO [7, т.2]. Співвідношення вмісту води або груп OH у структурі різних матеріалів і зміни температур їх плавлення або склування відносяться до ще не вивчених квантових закономірностей складних багаточастинкових систем, що також вказує на важливість наших досліджень.

Спектри ІЧ поглинання плавленого кварцу і скла досліджувались на двопробеновому дифракційному спектрометрі Specord 80M. Добре виражена смуга поглинання внутрішніх гідроксильних груп OH в області $\sim 3650 \text{ cm}^{-1}$ спостерігалася за високочастотною межею помітної інтенсивності смуг обертонів і складових тонів SiO_2 і була досить ізольована. Особливістю валентної смуги поглинання ν_{OH} різних зразків плавленого кварцу (ПК) є спостереження в ній вузьких глибоких «провалів». Положення цих вузьких ліній від'ємної полярності на фоні смуги поглинання зберігається для різних зразків ПК, що показано на рис.1а. Зі збільшенням концентрації груп OH у ПК інтенсивність смуги ν_{OH} підвищується (крива 2). Смуга розширюється і більше зміщується в низькочастотну сторону, що, згідно широковідомому критерію [8], вказує на підсилення взаємодії OH груп. При цьому область спостережуваних «провалів» розширюється, і вони поглиблюються. При приблизно однаковій концентрації OH груп у різних зразках ПК смуги їх поглинання майже співпадають, що показано на рис.1б. Але в більш тонкому зразку SiO_2 величини провалів зменшуються і не змінюються навіть при використанні більш вузьких спектральних щілин. Всі спектри реєструвались на двопробеновому спектрометрі, і їх не можна пояснити різною концентрацією пари води в різних плечах спектрометру, так як в одному і тому ж спектрі лінії пари могли спостерігатися і в додатній, і

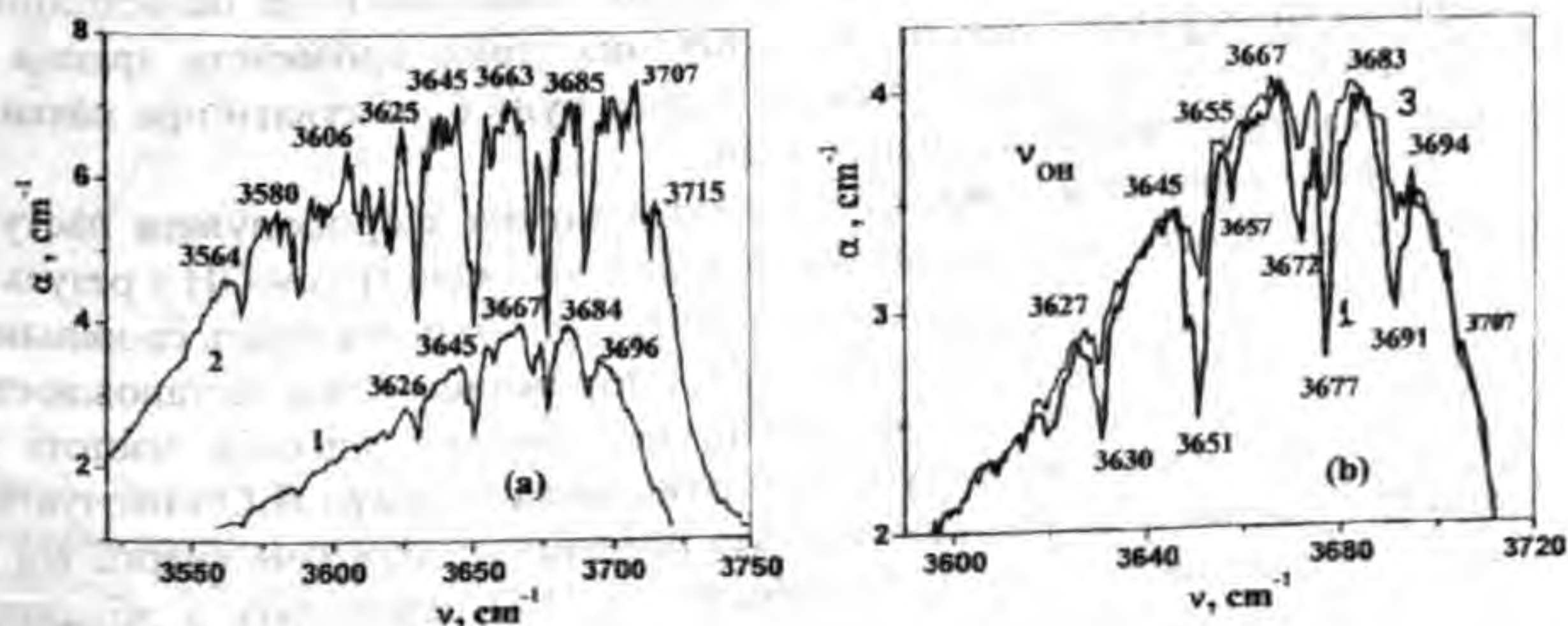


Рис.1. Частотні залежності коефіцієнтів ІЧ поглинання $\alpha(\nu)$ для зразків плавленого кварцу хорошої оптичної якості товщиною 6,14 (1) і 5,13 мм (2) (а), а також 6,14 (1) і 2,55 мм (3, кварц КУ-2) (б). На фоні смуг поглинання ν_{OH} спостерігаються «провали» на частотах колиально-обертальних переходів молекул H_2O в атмосфері.

від'ємній полярності. Слід відмітити, що при дослідженні інших речовин, в яких відсутні коливальні смуги ОН зв'язків, спостережувані лінії парів H_2O мають на порядки менші амплітуди. Це додатково вказує на особливість даного резонансного випадку, коли смуги поглинання внутрішніх ОН груп у ПК збігаються з лініями поглинання парів.

Можна було думати, що тонка структура смуги поглинання ОН груп зумовлена їх різним положенням у структурі тетраедрів SiO_4^{4-} і формуванням зонної структури смуги поглинання при взаємодії різних ОН груп. Але виявилось, що більшість «провалів» поблизу максимумів смуг поглинання ν_{OH} в області $3565\text{--}3712\text{ см}^{-1}$ співпадають з коливально-обертальними лініями в спектрі газоподібної атмосферної води [9]. Тобто природа спостережуваних «провалів» у меншій мірі зумовлена розташуванням ОН груп у структурі плавленого кварцу, а в основному пов'язана з коливально-обертальним рухом молекул води.

2. Ймовірний механізм формування «провалів» в спектрах поглинання і можливість реалізації лазерних переходів на парах води

Проведене порівняння спостережуваних «провалів» зі спектром поглинання парів води показало зв'язок положень та інтенсивностей спостережуваних ліній з коливально-обертальним спектром газоподібної молекулярної води. Молекули H_2O не можуть знаходитись в об'ємі кварцу, що зумовлено відсутністю деформаційної смуги поглинання, яка спостерігається в ряді мінералів [2,3]. Тому спостережувані вузькі лінії від'ємної полярності слід пов'язувати з парами води в атмосфері. Найбільш інтенсивні «провали» 3651 і 3677 см^{-1} за положенням та інтенсивністю співпадають з найбільш інтенсивними в цій області лініями пари води. Суттєво, що на частотах цих ліній прозорість зразків ПК збільшується, а не зменшується, як можна було б очікувати при наявності додаткового поглинання в парах води.

На основі спостережуваних фактів можна запропонувати наступну модель досліджуваного явища. Резонансно збуджені групи ОН у результаті ізолюваності їх спектра від спектра матриці SiO_2 релаксують сповільнено. Під дією постійного збудження ІЧ випромінюванням встановлюється певна їх рівноважна концентрація, яка завдяки високій частоті ν_{OH} відповідає високій температурі. При зіткненнях молекул H_2O з оточуючого повітря з поверхнею ПК відбувається резонансна передача енергії від ПК до газоподібних молекул H_2O . Молекули H_2O переходять у збуджений стан і випромінюють, відлітаючи від поверхні SiO_2 . В результаті цього частина поглинутої енергії повертається до пучка світла, що проходить поглинаюче середовище. В каналі порівняння такого випромінювання немає, тому завжди спостерігається розбаланс двох каналів спектрометра, який проявляється в спостереженні глибоких «провалів» у смугах

поглинання. Ясно, що ці «провали» відповідають вузьким лініям випромінювання збуджених молекул H_2O .

Для виділення спектра випромінювання збуджених молекул H_2O обвідна смуги поглинання ν_{OH} апроксимувалась поліномом з використанням точок максимумів, як це показано на рис.2а. Тоді в різницевому спектрі можна отримати спектр генерованого випромінювання в межах ν_{OH} смуги. Загальний вид цього спектра показаний на рис.2б. Тут же точками вказані положення і спектральні коефіцієнти поглинання пари води згідно моделі Гуді [9], нормовані на максимум лінії випромінювання 3675 cm^{-1} (довжина хвилі $2,721\text{ мкм}$). При цьому дві найбільш інтенсивні лінії пари добре узгоджуються з експериментом. Інтенсивності ліній випромінювання 3630 і 3690 значно більші, ніж відповідні інтенсивності ліній поглинання H_2O , а для крайніх ліній 3568 і 3711 cm^{-1} інтенсивності менші, ніж для поглинання пари на відповідних частотах. Відмітимо, що узгодження спектра випромінювання з лініями поглинання пари води не повне. Деяким генерованим лініям, наприклад, 3572 cm^{-1} , немає аналогу в спектрі поглинання, деякі лінії випромінювання зміщені на величину, що перевищує похибку вимірювання. Це може вказувати на роль вимушених переходів між збудженими станами молекул H_2O , які не з'являються при поглинанні молекул у термічно рівноважному стані, а також на роль супутніх резонансних нелінійних хвильових процесів[1,10-13].

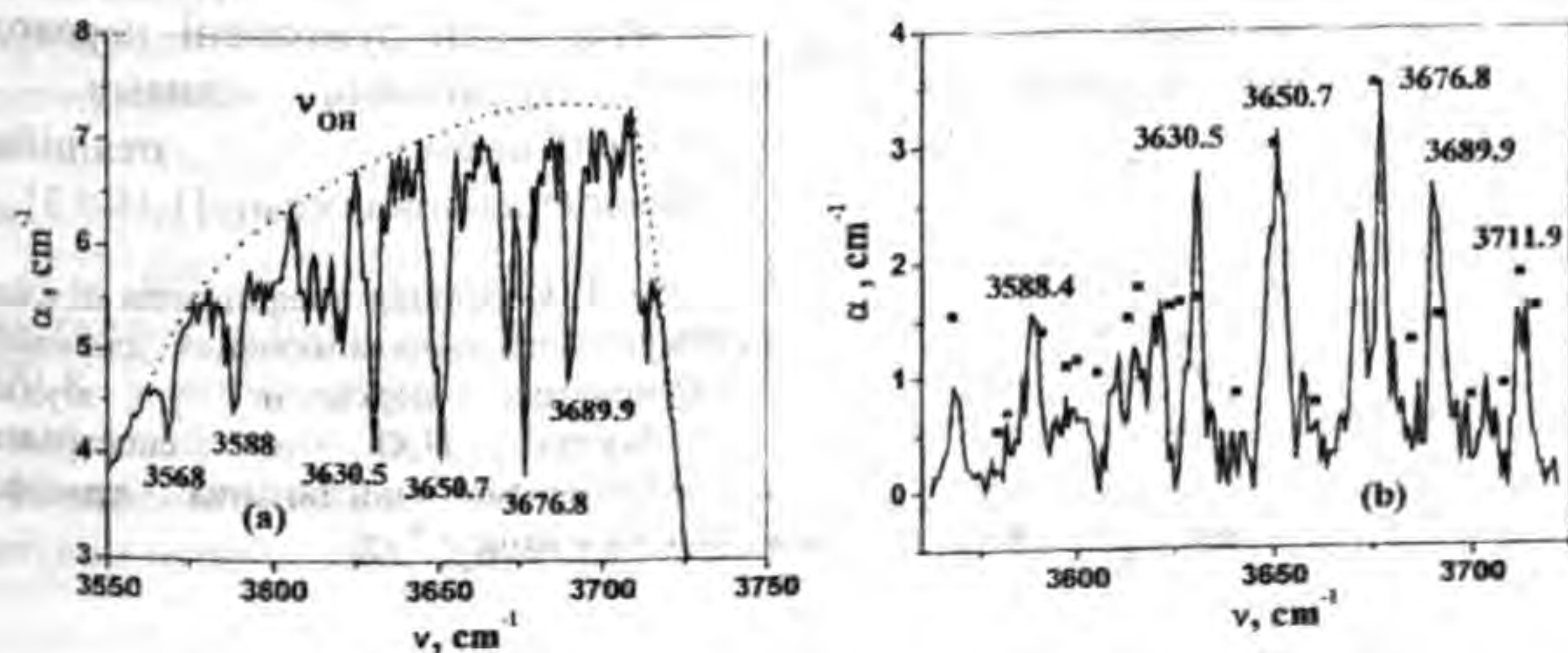
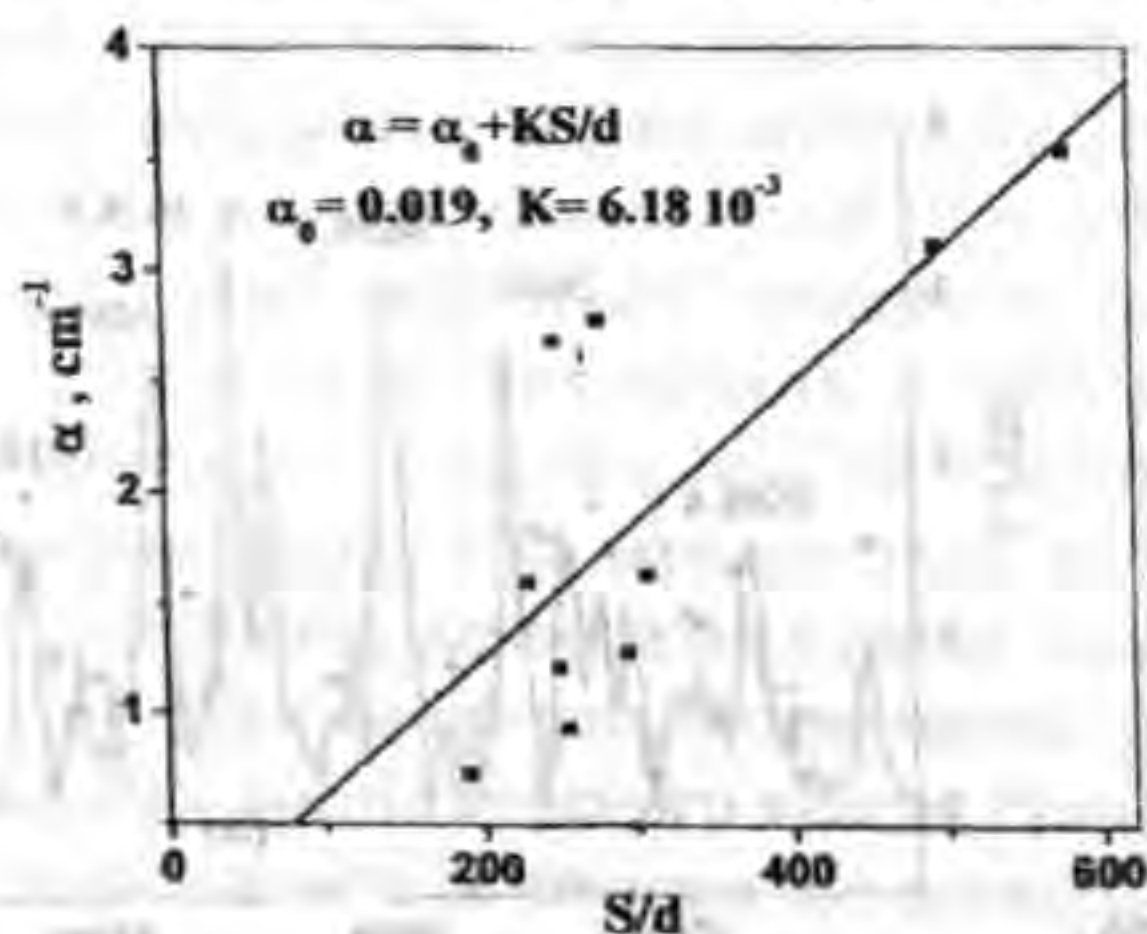


Рис.2. Виділення ліній випромінювання пари води на фоні спектра коефіцієнтів поглинання $\alpha(\nu)$ гідроксильних груп у плавленому кварці (а), і отриманий спектр генерації збуджених молекул H_2O , та його порівняння з нормованим спектром коефіцієнтів поглинання води в атмосфері згідно відомої моделі Гуді [9] (б).

Як видно з порівняння спостережуваних коефіцієнтів поглинання ($\sim 7\text{ cm}^{-1}$, рис.2а), для смуги гідроксильних груп у ПК і коефіцієнтів підсилення генерованого випромінювання ($\sim 3,5\text{ cm}^{-1}$, рис.2б), приблизно половина

енергії, що поглинається, випромінюється в напрямку приймача енергії. Це може вказувати на спостереження вимушеного випромінювання на окремих довжинах хвиль в області 2,7-2,8 мкм з вузькою діаграмою направленості. За умови же домінування спонтанного випромінювання в напрямку приймача енергії випромінювалось би значно менше енергії. Можливість такого ж самого випромінювання в зворотному напрямку може вказувати на дуже високу ефективність спостережуваних процесів.

Спостережувані коефіцієнти підсилення майже на порядок перевищують коефіцієнти підсилення в рубіновому лазері. Тут наведені коефіцієнти підсилення ($\sim 3,5 \text{ см}^{-1}$) в розрахунку на товщину кварцової пластинки 5,13 мм. Реальна товщина випромінювального шару пари H_2O визначається шляхом дифузії збуджених молекул за середній час випромінювання. З урахуванням цього коефіцієнти підсилення можуть досягати аномально великих величин, що може становити практичний інтерес. У відомій моделі Гуді для поглинання атмосферної вологи, лінії H_2O на малих частотних інтервалах, включаючи всі ізотопи і слабкі лінії, групуються і характеризуються узагальненим параметром S/d , де S – інтенсивність лінії, d – середня відстань між лініями [9]. Досліджена кореляція коефіцієнтів підсилення в парах води з параметром S/d , що показано на рис.3. У цілому спостерігається лінійна кореляція між цими величинами, хоча є і деякі відхилення. Вони вказують на складність



спостережуваних процесів, які можуть бути зумовлені переходами між збудженими станами або резонансними нелінійними хвильовими процесами [1,10-13].

Рис.3. Кореляція коефіцієнтів підсилення вимушеного випромінювання для найбільш інтенсивних переходів у збуджених молекулах H_2O зі спектральними коефіцієнтами поглинання атмосферної вологи в моделі Гуді.

Висока направленість випромінювання молекул H_2O може бути зумовлена колективним характером коливальних збуджень системи гідроксильних груп OH у плавленому кварці. Колективізація коливань груп OH при їх малій концентрації в SiO_2 на наш погляд, зумовлена резонансом коливань зв'язків O-H з другим обертоном $3\nu_3(\text{F}_2)$ валентної асиметричної моди тетраедрів SiO_4^{4-} в структурі ПК [14]. В результаті цього, збудження OH груп являють собою хвилеподібні моди, які характеризуються хвильовим вектором. Цей імпульс, ймовірно,

передається збудженим молекулам і сприяє їх подальшому направленому випромінюванню.

Відомо багато лазерних переходів на коливально-обертальних лініях окремих молекул, наприклад, CO_2 , CS_2 , H_2O , D_2O , HCN , HF , CH_3OH та ін. [15]. Зокрема, багато лазерних переходів спостерігається при імпульсному розряді в парах H_2O . Збуджувані енергетичні рівні розміщені в області $3600\text{--}5100\text{ см}^{-1}$, а лазерні переходи – в області $20\text{--}220\text{ мкм}$. Зокрема, найбільш інтенсивна генерація спостерігається на обертальних переходах типу асиметричної дзиги $6_{33}\text{--}5_{50}$ і $5_{14}\text{--}4_{41}$ для коливальних переходів $(001)\text{--}(020)$ і $(100)\text{--}(020)$ з відповідними довжинами хвиль $27,9707$ і $33,029\text{ мкм}$ ($357,516$ і $302,76\text{ см}^{-1}$) і максимальними потужностями 3 і 7 Вт . Аналогічні лазерні переходи спостерігалися на молекулах D_2O зі збудженням рівнів в області $3200\text{--}4100\text{ см}^{-1}$. В цьому випадку максимальна потужність $0,3\text{--}0,4\text{ Вт}$ спостерігалась на обертальних переходах $13_{59}\text{--}12_{66}$ і $11_{57}\text{--}10_{64}$ між коливальними рівнями $(100)\text{--}(020)$ відповідно з довжинами хвиль $33,896$ і $36,324\text{ мкм}$ ($295,02$ і $275,30\text{ см}^{-1}$). Незважаючи на дуже велику кількість коливально-обертальних переходів у парах води, генерація в області $2\text{--}4\text{ мкм}$ не була отримана. Згідно даним [15], генерація на довжинах хвиль $2,279$ і $4,77\text{ мкм}$ (відповідно $4387,6$ і $2096,0\text{ см}^{-1}$) не підтвердилась. Використання нами іншого способу збудження і поєднання фактично елементів твердотільних і газових лазерів дозволило реалізувати ряд лазерних переходів на молекулах H_2O в області $2,7\text{--}2,8\text{ мкм}$. Вкажемо, що деякі лазерні переходи в цій області отримано раніше на обертальних переходах Р гілок для молекул HF при неперервному розряді в надзвуковому потоці газової суміші F і H_2 або при імпульсному розряді в потоці CBrF_3 і H_2 [15]. Слід відзначити також існування природних лазерів на обертальних лініях $6_{16}\text{--}5_{23}$ молекул H_2O з довжиною хвилі $1,35\text{ см}$ ($22235,08\text{ МГц}$), відкритих у 1968 р. в областях зіркоутворення. Для збудження відповідних обертальних станів необхідна температура більша 600 К . у даній роботі вперше показано, що лазерні переходи можуть бути реалізовані з використанням найбільш поширених речовин у природі: води і плавленого кварцу. Можливо, що такі лазери при накачці сонячним світлом можуть самі собою реалізуватися в земних умовах.

3. Висновки

1. Вперше встановлено, що вузькі супутні лінії атмосферних молекул з дипольними моментами, які спостерігаються в спектрах ІЧ поглинання різних речовин, можуть бути використані для отримання додаткової інформації, наприклад, про взаємодію газових молекул з поверхнею твердого тіла. Глибокі «провали» в смугах поглинання вказують на резонансну передачу збудження від конденсованих середовищ до атмосферних газів. Випромінювання збуджених газових молекул на

фіксованих частотах коливально-обертальних переходів проявляється в зменшенні поглинання у порівнянні з іншими частотами.

2. Особливо ефективна резонансна передача збудження від внутрішніх груп ОН у структурі плавленого кварцу до коливально-обертальних станів молекул води в оточуючому повітрі при їх зіткненнях з полірованою поверхнею. Це доводиться доброю узгодженістю положення і інтенсивності «провалів» зі спектром поглинання атмосферної вологи в області 2,7-2,8 мкм. У результаті цього енергія світла, що поглинається в кварці, частково не релаксує в тепло, а випромінюється в напрямку світлового пучка, що проходить через кварцову пластинку. На колективну природу збуджень ОН груп і вклад вимушеного випромінювання молекул H_2O вказує його висока направленість, а також зростання інтенсивності випромінювання зі зростанням концентрації ОН груп і загальної інтенсивності їх смуг поглинання.

3. В роботі вперше реалізовано ряд лазерних переходів з використанням найбільш поширених у природі речовин: води і кварцу. Вимушені переходи спостерігаються між коливально-обертальними рівнями пари води, які збуджуються в результаті резонансної передачі енергії від коливань ОН груп у плоскопаралельній пластинці плавленого кварцу. Для її збудження використано теплове випромінювання нагрітої струмом ніхромової спіралі з температурою поверхні $1000^{\circ}C$. Генероване ІЧ випромінювання на дискретних довжинах хвиль реєструвалося в спектрометрі за допомогою вакуумного термоелемента.

4. Даний метод з використанням випромінювання газових молекул можна застосовувати для вимірювання рівня збудження в конденсованому стані речовини, наприклад, поблизу фазових переходів. Його слід рекомендувати для визначення ефективної температури речовини, в тому числі, на значних відстанях, наприклад, в астрофізиці. Причому для кожної частотної області і температурного інтервалу необхідний спеціальний підбір резонансних молекул.

Всі спостережувані особливості вказують на встановлення нового явища, яке важливе як у спектроскопії, так і для практичної реалізації ІЧ лазерів. Автори виражають вдячність Охріменко Б.А. і Яблочкову С.М. за обговорення проблем природних мазерів і склоподібного стану речовини, а також отриманих результатів.

Список використаної літератури

1. Кондиленко И.И., Корниенко Н.Е., Малый В.И., Понежа Г.В. Некоторые закономерности в спектрах обращенного комбинационного рассеяния// Квантовая электроника, Москва- 1981. -Т.8, №11- С.2447-2453.
2. Лазарев А.Н., Колебательные спектры и строение силикатов.- Л.: Наука, 1968.- 347 с.

3. Плюснина И.И. Инфракрасные спектры силикатов.- Изд. МГУ,- 1967. - 188 с.
4. Таран Ю.Н., Куцова В.З., Червоний И.Ф., Швед Е.Я., Фалькевич Э.С. Полупроводниковый кремний.- Запорожье, 2004.- 343 с.
5. Григорук В.І., Онисько Ю.Т., Слінченко Ю.А., Шанойло В.С. Характеристики волоконного каналу зв'язку з урахуванням мод оболонки// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки, - 2002.- № 3- С.286-290.
6. Grygoruk V.I., Dmytruk A.N., Ogenko V.M., Onys'ko Yu.T., Slinchenko Yu. A. On the controllable change of the refractive index of a silicone polymer// Ukr.J.Phys.- 2005, -V.50, №10- P.1183-1185.
7. Мазурин О.В., Стрельцина М.В., Швайко-Швайковская Т.П. Свойства стекол и стеклообразующих расплавов. Справочник. - Л.: Наука, -1973.- Т1, 443 с; 1075, Т2 , 632 с.
8. Йогансен А.В. Инфракрасная спектроскопия и спектральное определение энергии водородной связи, Сб. Водородная связь.- М.: Наука, 1981. - С.112-155.
9. Справочник по инфракрасной технике. Ред.У.Волф, Г.Цисис, Т.1: Физика ИК-излучения.- М., Мир,- 1995.- 606 с.
10. Корниенко Н.Е. Пространственная эволюция амплитуд волн, устойчивость решений и бифуркации при генерации суммарных и разностных частот в условиях двухфотонного резонанса// Квантовая электроника, Москва,- 1985.- Т.12, №8- С.1595-1601.
11. Корниенко Н.Е. Бифуркации и предельные эффективности четырехфотонной резонансной генерации суммарных и разностных частот при бигармонической накачке// Оптика и спектроскопия, -1986.- Т.60, № 1- С.186-188.
12. Корнієнко М.Є., Міхницький С.І. Хвильове просвітлення речовини при вимушеному комбінаційному розсіянні світла на дипольно-активних коливальних модах// УФЖ,-2002.-Т. 47, № 6- С. 545-551.
13. Корнієнко М.Є., Міхницький С.І. Хвильове просвітлення речовини і високоефективна генерація випромінювання при вимушеному комбінаційному розсіянні світла на поляритонах// УФЖ , - 2002.- Т. 47, № 8- С. 726-737.
14. Применение спектров комбинационного рассеяния, под ред. А.Андерсона,- М.: Мир, 1977.- 586 с.
15. Справочник по лазерам. Перевод с англ. под ред. А.М.Прохорова,- М.: Советское радио, 1978.- Т.1, С.103-133.

Надійшла до редколегії 15.03.06

УДК 539.2

Володимир С. Овечко,
Андрій О. Сальніков

Нестационарні рівняння для густини ймовірності чистих квантових станів

Виконано перехід від нестационарного рівняння Шредінгера для комплексної ψ -функції до системи диференціальних рівнянь у частинних похідних для густини ймовірності $\rho(x,t)$ і параметра $0 \leq P(x,t) \leq 1$. Розглянуто стаціонарне рівняння за умови $\partial \rho(x,t) / \partial t = 0$.

Ключові слова: нестационарне рівняння Шредінгера, густина ймовірності, функція дії, стаціонарний рух частинки.

Volodymyr S. Ovechko,
Andrii O. Salnikov

Nonstationary equations for the density of the probability for the pure quantum states

The transition from the nonstationary Schrodinger equation for the complex ψ -function to the system of differential partial derivatives equations for the density of the probability $\rho(x,t)$ and parameter $0 \leq P(x,t) \leq 1$ has been carried out. It was. The stationary equation under the condition $\partial \rho(x,t) / \partial t = 0$ has been considered.

Key words: nonstationary Schrodinger equation, density of probability, action function, stationary motion of the particle.

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

1. Вступ

Математичний апарат квантової фізики ґрунтується на хвильовій механіці Е. Шредінгера або матричній механіці В. Гейзенберга [1]. У будь-якому разі, використовуються комплексні величини (хвильові функції і оператори). Оскільки результати будь-яких експериментів є дійсні числа, природним є формулювання основних рівнянь так саме для дійсних величин. Такими величинами можуть бути $\rho(x,t)$ - густина ймовірності і $S(x,t)$ - функція дії. Нагадаємо, що порівняння $S(x,t)$ з квантом дії $\hbar$ визначає умову переходу від класичної механіки до квантової і навпаки [2].

В попередній роботі [3] було одержано стаціонарне рівняння для густини ймовірності $\rho(x) = |\psi(x)|^2$ чистих квантових станів

$$\rho'''(x) + 4f(x)\rho'(x) + 2f'(x)\rho(x) = 0, \quad (1)$$

де $f(x) = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E - V(x))$.

Показано, що, якщо знайдено фундаментальну систему розв'язків $U_1(x)$ і $U_2(x)$ рівняння

$$U''(x) + f(x)U(x) = 0, \quad (2)$$

то розв'язок рівняння (1) запишеться у вигляді

$$\rho(x) = C_1 U_1^2(x) + C_2 U_1(x)U_2(x) + C_3 U_2^2(x) \quad (3)$$

Як неважко помітити, рівняння (2) - це стаціонарне рівняння Шредінгера.

2. Нестационарні рівняння

Наступним кроком (після (1)) має бути знаходження нестационарного рівняння (або системи рівнянь). Будемо виходити з нестационарного рівняння Шредінгера [1,2]. Запишемо вирази для комплексно спряжених рівнянь

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V\psi,$$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^* = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi^* + V\psi^*, \quad (4)$$

домножимо перше рівняння на ψ^* , а друге - на ψ і віднімемо від першого друге рівняння. Тоді, якщо скористатися тотожним перетворенням

$$\rho = \rho P + \rho(1-P), \text{ де } \rho P = (\operatorname{Re} \psi)^2, \text{ а } \rho(1-P) = (\operatorname{Im} \psi)^2, \quad 0 \leq P \leq 1,$$

одержимо

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{\hbar}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\rho \frac{\partial}{\partial x} P}{\sqrt{P(1-P)}} \right). \quad (5)$$

Рівняння (5) - це одновимірне рівняння неперервності. Неважко подати його у тривимірному випадку

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{j} = 0, \quad (6)$$

де

$$\vec{j} = -\frac{\hbar}{2m} \frac{\rho \nabla P}{\sqrt{P(1-P)}} - \text{потік густини ймовірності,}$$

$$\nabla P = \vec{i} \frac{\partial P}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial P}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial P}{\partial z}.$$

Для одержання рівняння відносно $\frac{\partial P}{\partial t}$, додамо рівняння системи (4) і візьмемо до уваги представлення ψ (і відповідно ρ) у вигляді двох складових $P\rho$ і $(1-P)\rho$. Тоді

$$\frac{1}{\sqrt{P(1-P)}} \frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2m} \left[\frac{\rho''}{\rho} - \frac{1}{2} \left(\frac{\rho'}{\rho} \right)^2 + \frac{P'^2}{P(1-P)} \right] + \frac{2V(x)}{\hbar}. \quad (7)$$

$$\text{Тут } \rho' = \frac{\partial \rho}{\partial x}, \rho'' = \frac{\partial^2 \rho}{\partial x^2}, P' = \frac{\partial P}{\partial x}.$$

Система рівнянь (6), (7) складає аналог нестационарного рівняння Шредингера, але для дійсних величин ρ і P . Дослідимо, за яких умов ця система переходить до стаціонарного рівняння (1)? Для цього покладемо $\partial \rho / \partial t = 0$ у (5) і розв'яжемо (7) з урахуванням попередньої умови. Тоді одержимо рівняння

$$\rho''' + 4\rho' \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar}{2\sqrt{P(1-P)}} - V(x) \right) \right] + 2\rho \left[\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{\hbar}{2\sqrt{P(1-P)}} - V(x) \right) \right]' = 0 \quad (8)$$

Порівняння (8) і (1) накладає умову і на P , а саме

$$\frac{\hbar}{2\sqrt{P(1-P)}} \frac{\partial P}{\partial t} = E, \quad (9)$$

де E - повна енергія частинки.

Як не важко помітити, величина

$$S(x,t) = \frac{\hbar}{2} \arcsin(2P-1) \quad (10)$$

є аналогом відомої з курсу класичної механіки [3] функцією дії. Її частинні похідні по часу і координаті визначають повну енергію і імпульс частинки відповідно.

З (9) знайдемо розв'язок для P

$$P = \frac{1}{2} \left[1 + \sin \left(\frac{2E}{\hbar} t + \arcsin(2P_0 - 1) \right) \right], \quad (11)$$

де $P(t=0) = P_0$.

Якщо $P_0 = 0$, то (11) спрощується

$$P(t) = \sin^2 \left(\frac{E}{\hbar} t \right), \quad (12)$$

якщо $P_0 = 1$, то

$$P(t) = \cos^2 \left(\frac{E}{\hbar} t \right) \quad (13)$$

Є очевидним те, що, якщо ми додамо до фази в (12) доданок, який не залежить від t , наприклад $-kx$, то розв'язок

$$P(x, t) = \sin^2 \left(\frac{E}{\hbar} t - kx \right) \quad (14)$$

так само буде задовільняти рівнянню (9).

Якщо до умови часової стаціонарності ρ додати просторову $\rho' = \rho'' = V = 0$, то із (7) одержимо

$$\frac{\partial P}{\partial t} = + \frac{\hbar}{4m} \frac{P'^2}{\sqrt{P(1-P)}}. \quad (15)$$

Після підстановки (14) у (15) визначимо

$$k = \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}. \quad (16)$$

Звідки, враховуючи $k = 2\pi/\lambda_B$, $E = mV^2/2$, одержимо

$$\lambda_B = \frac{h}{mV}. \quad (17)$$

Це є відомий вираз для довжини хвилі де Бройля. Таким чином, вона визначає просторовий період хвилі (14). А енергія E визначає частоту її осциляції $\omega = E/\hbar$. Знайдемо потік (6) для стаціонарного руху частинки, таким чином, руху з постійною швидкістю,

$$j_x = \frac{\hbar k}{m} \rho_0. \quad (18)$$

Отже, потік є постійною величиною і не залежить як від часу, так і від координати.

3. Модель рівномірного прямолінійного руху

Цікаво порівняти вирази для енергії E

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{mV^2}{2}. \quad (19)$$

Зліва - це вираз для енергії обертання об'єкта з постійним моментом імпульсу ($\hbar$), справа - кінетична енергія поступального руху. Таким чином, рух частинки можна уявити собі як обмін у часі і просторі енергією обертального і поступального рухів. Просторовий період такого руху λ_B , часовий період $T = 2\lambda_B/V$.

Подібний результат можна одержати, якщо уявити собі рух частинки в полі нескінченної однорідної циліндричної гвинтової лінії. Нехай її параметри наступні: крок повного оберту навколо осі z є λ . Тоді, як не важко побачити [4], інтегралом руху буде величина

$$M_z + \frac{\lambda}{2\pi} P_z = C_1, \quad (20)$$

де M_z - момент імпульсу,

P_z - імпульс, C_1 - константа.

Якщо до (20) додати умову збереження енергії (нагадаємо, що розглядається рівномірний прямолінійний рух)

$$M_{\infty}\omega + \frac{P_{\infty}^2}{2m} = C_2, \quad (21)$$

то системі рівнянь (20), (21) будуть задовільняти наступні значення:

$M_{\infty} = \hbar$, $\lambda = \lambda_B$, $P_{\infty} = h/\lambda_B$, $C_1 = 2\hbar$, $C_2 = 2E$, де λ_B , як і раніш, довжина хвилі де Бройля, $\hbar$ - стала Планка. Звідси випливає, що рівномірному прямолінійному руху відповідає модель циліндричного гвинтового поля з кроком λ_B .

4. Висновки

Таким чином, у роботі одержана система нестационарних рівнянь (6), (7) для густини ймовірності чистих квантових станів $\rho(x,t)$ і параметра $P(x,t)$, градієнт якого, зокрема, визначає потік густини ймовірності j . Розглянуто деякі граничні стаціонарні наближення для цих рівнянь. Запропонована гвинтоподібна модель рівномірного прямолінійного руху. Показано, що рух квантової частинки може бути описаний за допомогою двох дійсних функцій: $\rho(x,t)$ - густини ймовірності і $S(x,t)$ - квантової функції дії.

Література

1. Давыдов А.С. Квантовая механика.- М.: Главная редакция физико-механической литературы изд-во «Наука», 1973.
2. Венгер Є.Ф., Грибань В.М., Мельничук О.В. Основи квантової механіки. -К.: "Вища школа", 2002.
3. Овечко В.С. Стаціонарне рівняння для густини ймовірності чистих квантових станів. //Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки 2005, №3, - С. 440-444.
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е. М. Механика. I. - М.: «Наука», 1973.

Надійшла до редакції 13.03.2006

УДК 535.317.1

Юрій В. Пільгун¹

Вибір параметрів дискретизації оптичних сигналів при чисельному моделюванні

Розглянуто задачу чисельного моделювання системи проміжок-лінза-проміжок у рамках підходу хвильової оптики. Запропоновано критерії вибору довжини інтервалу дискретизації, кількості точок відліків та їх просторового розташування. Проаналізовано випадки невдалого вибору параметрів дискретизації.

Ключові слова: Фур'є оптика, дискретизація, чисельне моделювання.

¹ E-mail: ply@univ.kiev.ua

З розвитком комп'ютерної техніки набуло поширення її використання для моделювання поведінки фізичних систем. Інструмент, що дозволяє поставити достовірний чисельний експеримент, часто полегшує аналіз працездатності приладу та дозволяє перевірити принципи роботи для ідеалізованих об'єктів, які не можуть бути створені фізично. Також наявність такого інструменту корисна при аналізі оберненої задачі вимірювання, коли за отриманими вимірами потрібно встановити клас об'єкта та визначити його характеристики.

Дуже часто при аналізі задач когерентної оптики виникає потреба розрахувати розподіл оптичного поля після проходження світла системи із лінзи та проміжку простору. Труднощі моделювання такої системи пов'язані з тим, що лінза гостро фокусує пучок світла, і тому необхідно правильно обрати систему координат у початковій і результуючій

Yuriy V. Pilgun¹

Selection of optical signal sampling parameters for numerical modelling

The problem of numerical modelling of a space-lens-space system was considered using wave optics approach. The criteria for selection of sampling interval length, number of points and its location were proposed. Cases of improper selection of parameters were analyzed.

Key Words: Fourier optics, wave optics, sampling, numerical modelling.

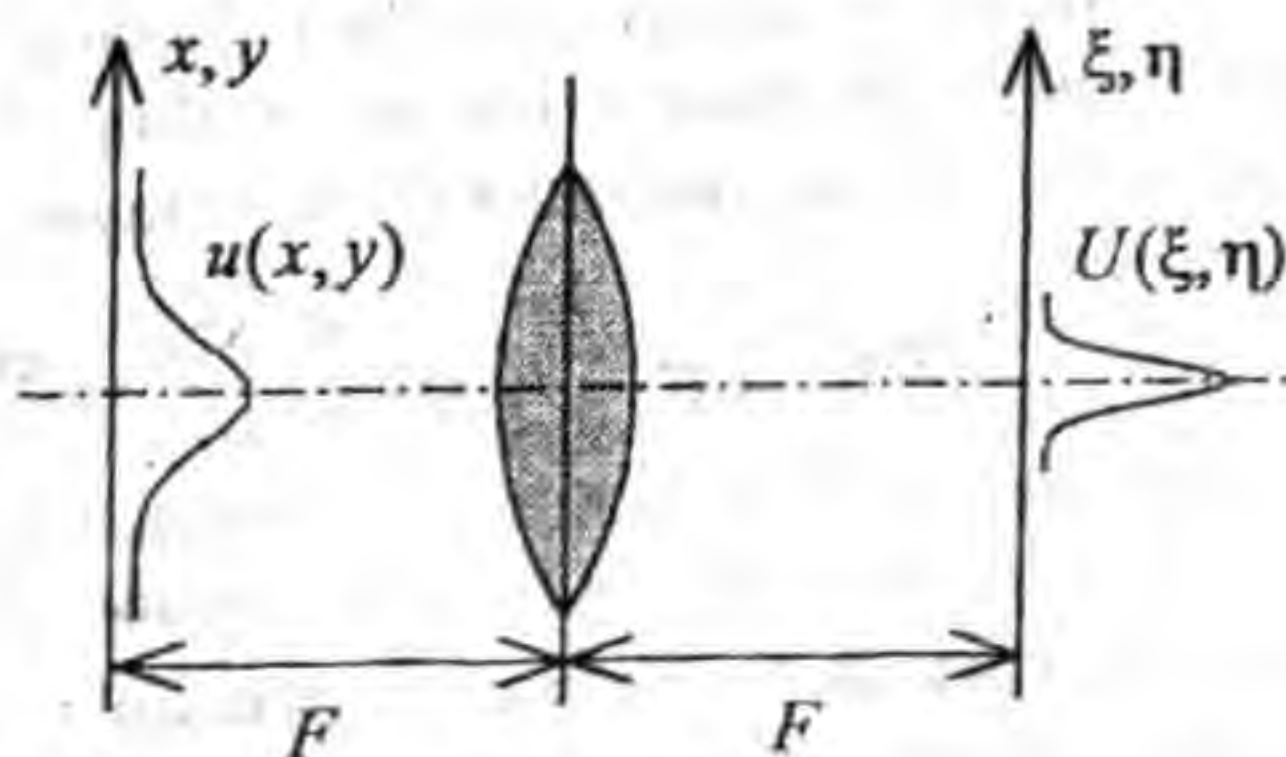


Рис. 1. Оптична схема системи, що виконує перетворення Фур'є

площині так, щоб дискретність та обмежена кількість розрахункових точок не впливала на достовірність чисельного наближення. Автору даної статті довелося дослідити це питання при моделюванні системи диференційно-фазового інтерферометра зі скануванням [1]. Однією із особливостей постановки задачі у такому застосуванні є те, що апертура лінзи не обмежує розмір вхідного пучка світла.

Для розгляду задачі проходження когерентного світла через лінзу та проміжок простору часто використовують апарат Фур'є оптики [2]. Для лінзи у конфігурації, що зображена на рис. 1, перетворення функції розподілу світла може бути представлено аналітично. Виконавши умови наближення Френеля для опису розповсюдження світла через проміжок простору, та вважаючи лінзу дуже тонкою та такою, що має нескінченну апертуру, поведінку системи можна описати інтегралом Фур'є [2]

$$U(\xi, \eta) = \frac{1}{i\lambda F} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} u(x, y) \exp\left[-i \frac{2\pi}{\lambda F} (x\xi + y\eta)\right] dx dy, \quad (1)$$

де λ – довжина хвилі світла, F – фокусна відстань лінзи, $u(x, y)$ – деякий розподіл комплексного поля світла у передній фокальній площині лінзи, $U(\xi, \eta)$ – результуючий розподіл світла після проходження системи.

Чисельно розрахувати інтеграл (1) можна, використовуючи дискретне перетворення Фур'є [3]. Для цього необхідно представити неперервну функцію $u(x, y)$ у вигляді дискретного набору її відліків у певним чином обраних точках дискретизації. Місцезоташування та кількість відліків має принципове значення, оскільки впливає на адекватність розрахунку інтеграла скінченою сумою. Звичайно використовують дискретизацію з рівновіддаленим розташуванням відліків на певному скінченому інтервалі. Формула для дискретного розрахунку інтегрального перетворення (1) має вигляд

$$U_{p,q} = \frac{-i}{\lambda F} \cdot L^2 \cdot \frac{1}{N^2} \sum_{l=0}^{N-1} \sum_{k=0}^{N-1} u_{k,l} \exp\left[-i 2\pi \left(\frac{pk}{N} + \frac{ql}{N}\right)\right]. \quad (2)$$

Тут N – кількість відліків, L – повна довжина інтервалу дискретизації по кожній з координат, $u_{k,l}$ – значення відліків вихідної функції, $U_{p,q}$ – значення відліків результуючої функції. Слід відмітити, що, хоча конкретні координати розташування відліків x_k, y_l у дану формулу безпосередньо не входять, від них залежить місцезнаходження відліків ξ_p, η_q функції U , значення якої ми розраховуємо. При виборі

$$u_{k,l} = u(x_k, y_l),$$

$$x_k = L \cdot \frac{k - \text{floor}(N/2)}{N}, \quad (3)$$

$$y_l = L \cdot \frac{l - \text{floor}(N/2)}{N},$$

відліки у результуючій площині прийматимуть значення у точках

$$\begin{aligned}U_{p,q} &= U(\xi_p, \eta_q), \\ \xi_p &= \lambda F \cdot \frac{N}{L} \cdot \frac{p - \text{floor}(N/2)}{N}, \\ \eta_q &= \lambda F \cdot \frac{N}{L} \cdot \frac{q - \text{floor}(N/2)}{N},\end{aligned}\quad (4)$$

де $\text{floor}(x)$ – функція, що повертає цілу частину числа x .

Дискретне перетворення Фур'є (2) має властивість періодичності – як вихідна функція, так і результуючий спектр вважаються періодичними, і саме тому можуть бути описані скінченою кількістю дискретних відліків. Тому для обрахунку значень інтеграла (1) з використанням дискретного перетворення, звичайно, необхідно застосовувати ряд прийомів, щоб отримати коректне чисельне наближення. Для того, щоб уникнути впливу періодичності, звичайно, функцію або доповнюють достатньою кількістю нулів, значно збільшуючи таким чином період повторення, або використовують деяку функцію вікна, що на краях інтервалу дискретизації швидко прагне до нульового значення [4]. В задачах хвильової оптики світло, звичайно, зосереджене в деякій скінченій області, причому його інтенсивність автоматично достатньо швидко наближується до нуля при виході за цю область внаслідок обмеженості світла апертурою оптичної системи. Тому тут немає потреби у застосуванні якихось спеціальних прийомів.

При використанні обрахункової формули (2) загальна довжина інтервалу дискретизації D у результуючій площині взаємопов'язана із довжиною інтервалу L у вхідній та залежить від параметрів оптичної системи – від довжини хвилі світла та фокусної відстані лінзи:

$$D = \lambda F \cdot \frac{N}{L}. \quad (5)$$

Оскільки кількість точок N в обох площинах однакова, відстань між відліками, як і довжини інтервалів, пов'язані оберненою залежністю.

Зрозуміло, щоб отримати достатній ступінь деталізації у результуючій площині чи то для візуалізації, чи для подальшого чисельного обрахунку, необхідно коректно вибрати довжину інтервалу дискретизації саме у вхідній площині.

Із властивостей масштабування інтегрального перетворення (1) виходить, що при збільшенні розміру зображення на вході, розмір результуючого образу у відповідну кількість разів зменшується. Позначивши характерний розмір плями світла у вхідній площині як w , а у результуючій як δ , запишемо це співвідношенням

$$\delta \sim \lambda F \frac{1}{w}. \quad (6)$$

Звичайно, в задачах хвильової оптики світло справді зосереджене в деякій скінченій центральній області, і ми можемо визначити її розмір. Для нашого випадку домовимось, що апертура лінзи значно більша за апертуру вихідного пучка світла і ніяк цей розмір не обмежує.

Отже, щоб отримати однаково гарний ступінь деталізації як у вихідній, так і в результуючій площині, ми повинні при виборі параметрів дискретизації одночасно керуватися виразом (5) для загальної довжини, та (6) для області локалізації сигналу. Нас цікавить випадок, коли в область вхідної площини розміром w потраплятиме рівно стільки ж відліків функції u , скільки відліків функції U потраплятиме в область результуючої площини розміром δ , тобто

$$N \frac{\delta}{D} = N \frac{w}{L}. \quad (7)$$

Підставивши вирази (5) та (6) у дане співвідношення, отримаємо оцінку для оптимальної довжини інтервалу дискретизації в залежності від розмірів області, де локалізовано сигнал

$$L \approx w \sqrt{N}. \quad (8)$$

Обравши L за даною формулою, ми отримаємо приблизно однаковий ступінь деталізації як вхідної функції, так і результуючої функції. Це з одного боку забезпечує адекватність вхідних даних для розрахунку, а з іншого – досягається достатня детальність на виході для подальшої обробки. Таким чином, ми раціонально використаємо масив розрахункових даних у обох площинах. Значне відхилення від оцінки (8) призводить до небажаних ефектів – на рис. 2 проілюстровано два невдалих варіанта вибору довжини інтервалу дискретизації: випадок “а” – малий інтервал L забезпечує гарну деталізацію вхідної функції, але призводить до втрати корисних точок у результуючій площині; випадок “б” – занадто великий інтервал L не дозволяє отримати достатню кількість точок у області локалізації сигналу w , тому більша кількість корисних точок у результуючій площині має сумнівну достовірність опису. Оптимальний випадок зображено на рис. 3.

Одночасно відстань між відліками має бути достатньо малою, щоб виконувався критерій Найквіста. Вважаючи, що сигнал, який потрапляє на

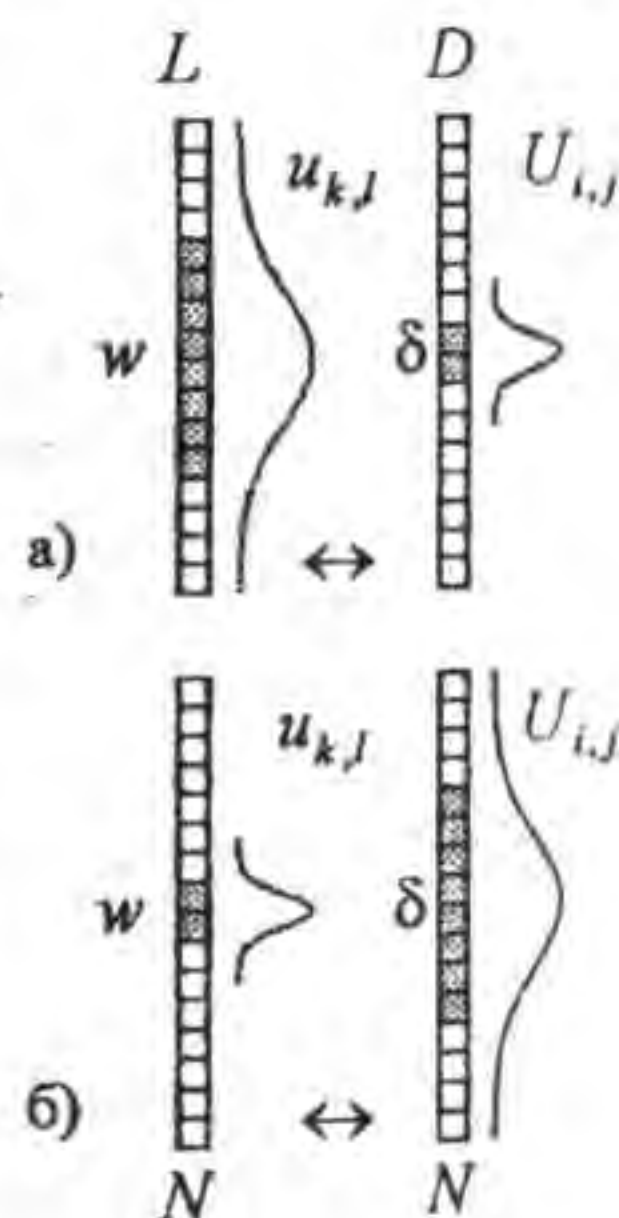


Рис. 2.
Невдалий вибір
розміру інтервалу
дискретизації

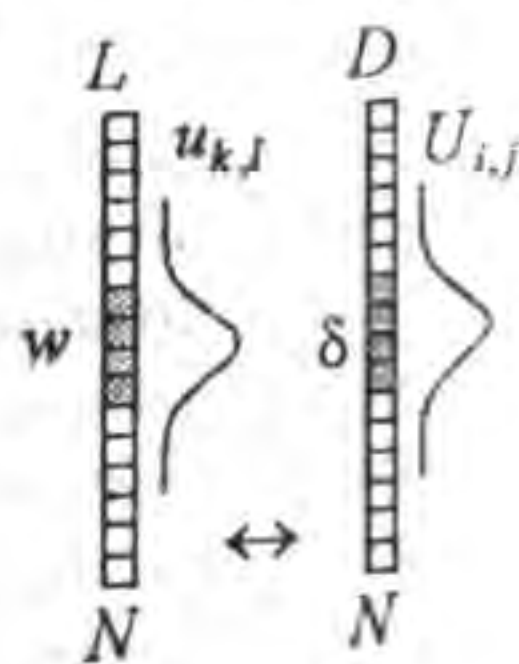


Рис. 3.
Оптимальний
вибір розміру
інтервалу
дискретизації

вхід даної системи, сформований оптичною системою з числовою апертурою $ЧА$, вимога до кроку дискретизації може бути сформульована як

$$\frac{L}{N} < \frac{1}{2} \cdot \frac{0.61 \cdot \lambda}{ЧА} \quad (9)$$

Використовуючи одночасно оцінку (8) щодо довжини інтервалу L , необхідна кількість точок має бути

$$\sqrt{N} > 2 \cdot \frac{ЧА}{0.61} \cdot \frac{w}{\lambda} \quad (10)$$

Таким чином, ми встановили критерії вибору необхідної кількості відліків (10) та загальної довжини дискретизації (8), виходячи із загальних характеристик поля комплексної амплітуди світла на вході системи. В залежності від конкретного розподілу світла, обрані за такими критеріями параметри дискретизації можуть бути дещо неоптимальними, але у більшості практичних випадків така оцінка дозволяє одразу отримати адекватний результат. Приклад розрахованого поля на виході системи для модельного одновимірного розподілу світла наведений на рис. 4.

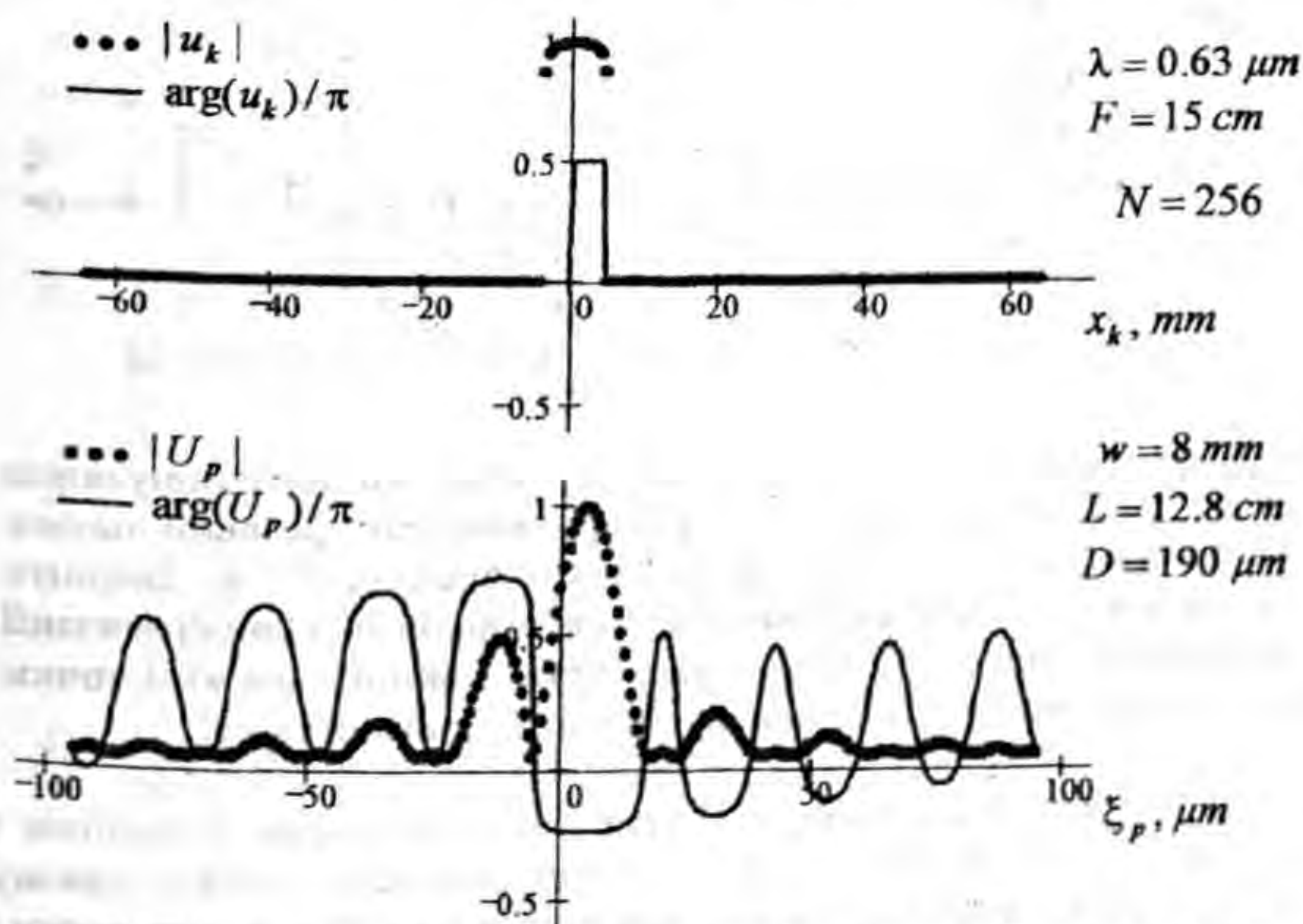


Рис. 4. Результат розрахунку розподілу поля. На вході системи обмежений апертурою $8 mm$ гаусівський промінь з параметром $w_0 = 16 mm$ та додатковою стрибкоподібною зміною фази на $\pi/2$. Амплітуда нормована на одиницю.

Слід також звернути увагу на часто повторювану промилку, що стосується визначення координат розташування відліків функції u . Розрахункова формула (2) у явному вигляді не містить ніяких вказівок щодо місцезоташування відліків. Але між координатами x_k, y_l та самими значеннями $u_{k,l}$ має бути певна відповідність, яка може випадково залишитися поза увагою. Значення відліку із нульовими індексами $u_{0,0}$ має бути взяті у точці з нульовими координатами $x_0 = 0, y_0 = 0$. У випадку центральносиметричної функції $u(x, y)$, при парній кількості точок, можна помилково розташувати сітку відліків симетрично відносно нуля, як це

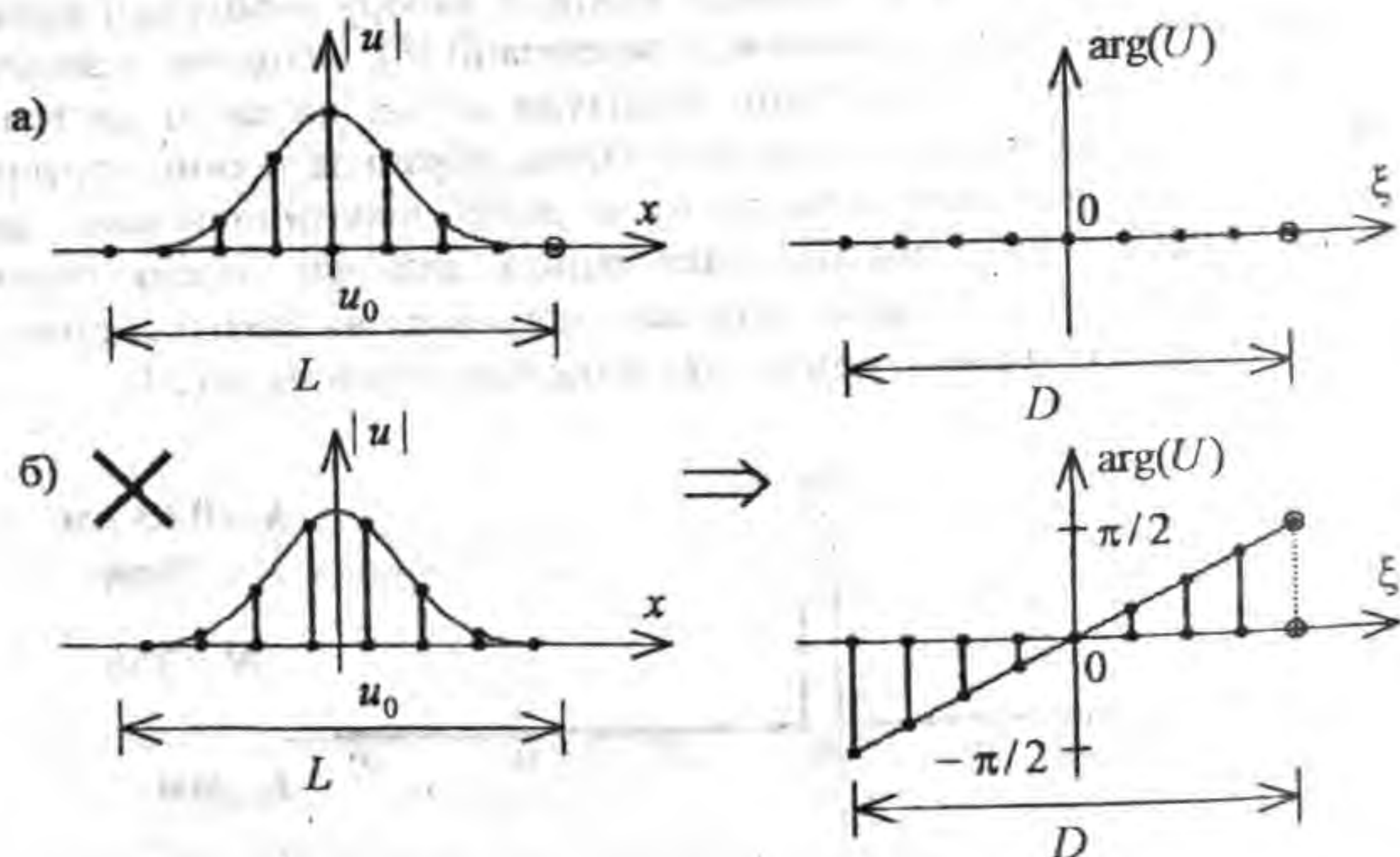


Рис. 5. Коректний (а) та невдалий (б) вибір місцезоташування відліків. У випадку невдалого вибору виникає фазовий нахил. Приклад наведено для парної кількості відліків $N = 8$. Зверніть увагу на взаємне розташування повного діапазону дискретизації та інтервалів між відліками – наявність “зайвої” дев’ятої точки пояснюється періодичним повторенням першого відліку.

зображено на рис. 4, випадок “б”. Тоді фактично жоден із відліків не матиме нульової координати, і приписування нульового індексу одному з них фактично означатиме зсув усієї сітки на півкроку. Після розрахунку це призведе до появи лінійного фазового нахилу у функції результуючого розподілу, якого насправді для центральносиметричного сигналу не має бути. Крім того, необхідно пам’ятати, що дискретне перетворення працює з періодичними сигналами, тому повний інтервал дискретизації L фактично є періодом повторення функції, на краях цього періоду

знаходяться не перший і останній відлік, а перший відлік і його періодичне повторення – останній відлік знаходиться всередині відрізка L .

Висновки

Проаналізовано задачу чисельного моделювання системи із лінзою, що виконує оптичне перетворення Фур'є. Для випадку відсутності апертурних обмежень для оптичної схеми, що виконує перетворення, сформульовані критерії вибору параметрів дискретизації на основі відомостей про розмір області локалізації вхідного сигналу та чисельної апертури системи, за допомогою якої вхідний сигнал був сформований. Використання отриманих оцінок для необхідної кількості відліків та повної довжини інтервалу дискретизації дозволяє отримати в результаті розрахунку розподіл поля на виході системи з достатньою для подальшого аналізу ступінню деталізації. При цьому використання запропонованих оціночних значень параметрів близьке до оптимального у тому сенсі, що детальність опису вхідного та результуючого поля світла приблизно однакова. Також наведено приклад результату розрахунку комплексного поля світла для модельного розподілу на вході.

Підхід, запропонований у роботі, може бути використаний для розгляду інших подібних задач, що використовують дискретне перетворення Фур'є.

Література

1. Коленов С.О., Смирнов Є.М., Пільгун Ю.В. Достовірність відтворення профілю поверхні в лазерному диференційно-фазовому скануючому мікроскопі // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2002. – 3. – С. 303-312.
2. Гудмен Дж. Введение в Фурье оптику: пер. с англ. М.: Мир. – 1970. – 364 с.
3. Press W.H. et al. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing Second Edition. Cambridge, UK: Cambridge University Press. – 1992. – 1020 p.
4. Сергиенко А.Б. Цифровая обработка сигналов. СПб: Питер. – 2003. – 604 с.

Надійшла до редакції 15.03.2006

УДК 533.951

Ольга В. Самчук,
Олександр І. Кельник

Випромінювання вістлерів модульованим електронним пучком у слабконеоднорідній плазмі

Розраховано випромінювання вістлерів циліндричним модульованим електронним пучком, що проходить крізь шар слабконеоднорідної плазми. Діаграма спрямованості є багатопелюстковою внаслідок накладання хвиль, які випромінюються з різних точок області черенковського резонансу. Таке випромінювання значно ефективніше (на 1-2 порядки для типових умов іоносферних експериментів) за перехідне випромінювання на різкій межі плазмових областей.

Ключові слова: модульований електронний пучок, випромінювання свистових хвиль, черенковський резонанс.

E-mail: oles@univ.kiev.ua

Olga V. Samchuk,
Oleksandr I. Kelnyk

Whistlers' Radioemission by Modulated Electron Beam in Weakly Inhomogeneous Plasma

Radioemission of the whistlers caused by the cylindrical modulated electron beam moving through the weakly inhomogeneous plasma layer has been calculated. Radiation pattern has many maxima due to the interference of the waves radiated from different Cherenkov resonance points. Such a radiation is much more effective (10-100 times for typical ionosphere experiments' conditions) than the transition radiation on the sharp plasma boundary.

Key Words: modulated electron beam, whistler waves' radioemission, Cherenkov resonance.

1. Вступ

В активних плазмово-пучкових експериментах в іоносфері [1] часто спостерігалось випромінювання електромагнітних хвиль, які реєструвалися на досить великих відстанях від випромінювача [2]. Зазначимо, що іоносферна плазма є анізотропною і, в більшості випадків, містить плавні неоднорідності. Тому становлять інтерес задачі про різні механізми випромінювання модульованих електронних пучків у такій плазмі. Зокрема, актуальним є дослідження випромінювання свистових хвиль (вістлерів), які завдяки своїм дисперсійним властивостям можуть поширюватися на великі відстані від області випромінювання із незначним згасанням. У роботах [3-4] теоретично досліджувалося перехідне випромінювання модульованих електронних пучків на різкій плазмовій неоднорідності. В той же час перехідне випромінювання як таке є досить слабким ефектом, тому виникає питання про можливість підвищення його ефективності. Можливим механізмом такого підвищення є резонансне випромінювання, пов'язаний з існуванням точок локального черенковського резонансу. Ці точки можуть існувати на неоднорідному плазмовому профілі завдяки тому, що свистові

хвилі є порівняно повільними. Таке випромінювання розглядалося в роботі [5], але для моделі необмеженого електронного потоку. В даній роботі розраховується випромінювання вістлерів, що виникає у точках локального черенковського резонансу на слабконеоднорідному профілі плазми при проходженні через нього модульованого електронного пучка обмежених поперечних розмірів.

2. Постановка задачі та вихідні рівняння

Розглядається шар плазми із концентрацією, що плавно змінюється вздовж осі z за лінійним законом. Цей шар пов'язує дві однорідні області з концентраціями $N_{\min}$ та $N_{\max}$.

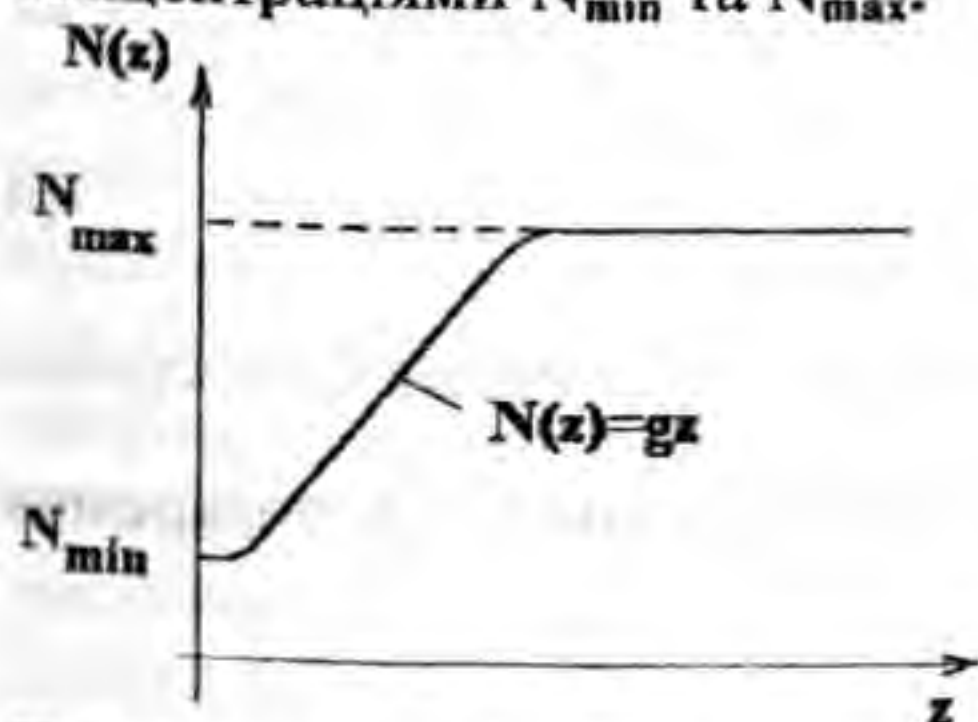


Рис.1. Профіль концентрації слабконеоднорідної плазми.

При цьому вважається, що в усьому плазмовому об'ємі виконуються умови свистового наближення ($\omega_{pe} \gg \omega_c \gg \omega \gg \omega_i$). Вздовж осі z спрямовано сталі магнітне поле B_0 , і рухається модульований циліндричний пучок електронів скінченного радіусу, густина струму якого має вигляд:

$$\vec{j} = \vec{e}_z j_0 A(r) \exp[i(\omega t - k_z z)], \quad A(r) = \begin{cases} 1, & r \leq r_0 \\ 0, & r > r_0 \end{cases} \quad (1)$$

Оскільки свистові хвилі є повільними, у просторовому спектрі власного електромагнітного поля такого пучка можуть знайтися складові, для яких у певній точці неоднорідного профілю виконуються умови черенковського резонансу. В цій точці будуть збігатися хвильові вектори відповідної складової поля пучка та свистової хвилі випромінювання. Для знаходження цього випромінювання з рівнянь Максвелла можна записати систему рівнянь у нормованих циліндричних координатах $\xi = \frac{\omega z}{c} = k_0 z$, $\rho = \frac{\omega r}{c} = k_0 r$, φ :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial E_\rho(\rho)}{\partial \xi} - \frac{\partial E_z(\rho)}{\partial \rho} \right) - k_0^2 (i\alpha E_\rho(\rho) + \epsilon_1 E_\rho(\rho)) = 0; \\ \frac{\partial^2 E_\rho(\rho)}{\partial \xi^2} + \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\rho E_\rho(\rho))}{\partial \rho} \right) - k_0^2 (-i\alpha E_\rho(\rho) + \epsilon_1 E_\rho(\rho)) = 0; \\ \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial E_\rho(\rho)}{\partial \xi} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial E_z(\rho)}{\partial \rho} \right) - k_0^2 \epsilon_1 E_z(\rho) = -i \frac{4\pi k_0}{c} j(\rho), \end{cases} \quad (2)$$

де введено позначення:

$$\varepsilon_{\perp} \approx \left(-\frac{\Omega_p}{\Omega_c} \right)^2; \quad \alpha \approx -\frac{\Omega_p^2}{\Omega_c}; \quad \varepsilon_{\parallel} \approx -\Omega_p^2, \quad \Omega_p^2 = \frac{4\pi N_p e^2}{m\omega^2}, \quad \Omega_c = \frac{eB_0}{mc\omega}. \quad (3)$$

Розв'язком системи рівнянь (2) для області черенковського резонансу буде поле випромінювання вістрів модульованим електронним пучком.

3. Область черенковського резонансу

Як відомо, умова черенковського резонансу виконується, коли напрямки і довжини хвильових векторів для пучка і випромінювання однакові. Прирівнюючи їхні поздовжні складові (рівність поперечних складових впливає з граничних умов), отримаємо умову черенковського резонансу для поздовжньої ($n_{\parallel}$) та поперечної ($n_{\perp}$) нормованих складових хвильового вектора випромінювання.

$$\frac{1}{2} \left(-n_{\perp}^2 + \frac{\Omega_p^2}{\Omega_c^2} - \sqrt{n_{\perp}^4 + 4 \frac{\Omega_p^4}{\Omega_c^2} + 4 \frac{\Omega_p^2}{\Omega_c^2} n_{\perp}^2} \right) = n_{\parallel}. \quad (4)$$

З співвідношення (4), використавши вираз для плазмової електронної частоти $\Omega_p = \sqrt{\frac{4\pi g \xi e^2}{m\omega^2}}$, можна одержати співвідношення для поперечного хвильового числа:

$$n_{\perp} = \frac{\sqrt{-mn_{\parallel}^4 \omega^2 \Omega_c^2 + 4e^2 g n_{\parallel}^2 \pi \xi + \frac{4e^4 g^2 \pi^2 \xi^2}{m\omega^2 \Omega_c^2} (4\Omega_c^2 - 1)}}{\sqrt{mn_{\parallel}^2 \omega^2 \Omega_c^2 - 6e^2 g \pi \xi}}. \quad (5)$$

Область черенковського резонансу відповідає дійсному значенню поперечного хвильового числа $n_{\perp}$. Тому вона обмежується двома особливими точками ξ_1 і ξ_2 , які знаходяться з умови, що чисельник і знаменник дробу у співвідношенні (5) прямує до нуля. ξ_1 і ξ_2 відповідно рівні:

$$\xi_1 = \frac{mn_{\parallel}^2 \omega^2 \Omega_c^2}{2e^2 g \pi (1 + 2\Omega_c^2)}; \quad \xi_2 = \frac{mn_{\parallel}^2 \omega^2 \Omega_c^2}{6e^2 g \pi}. \quad (6)$$

Слід зазначити, що співвідношення (4-5) отримані для загального випадку електромагнітних хвиль у плазмі з магнітним полем. Відповідна залежність для умов свистового наближення дає необмежену, з боку більших концентрацій плазми, область черенковського резонансу. Ці залежності в області між ξ_1 і ξ_2 практично не відрізняються, за винятком безпосереднього околу точки ξ_2 . Цей окіл, як показує подальший розрахунок, не дає істотного внеску у випромінювання, тому обмеження області випромінювання згори точкою ξ_2 і застосування свистового наближення для розрахунку в області між ξ_1 і ξ_2 можна вважати обґрунтованим.

4. Розрахунок поля випромінювання.

Для розрахунку поля випромінювання циліндричного модульовано-

го пучка його можна розкласти за плоскими хвилями струму, використавши перетворення Фур'є-Беселя. Підставивши відповідні вирази до системи (2), можна отримати звичайне диференціальне рівняння четвертого порядку щодо поздовжньої координати ξ . Оскільки це рівняння буде мати повільно змінні коефіцієнти, чотири його лінійно незалежні однорідні розв'язки $\phi_p(\xi)$ можна записати методом ВКБ. Розв'язок неоднорідного рівняння може бути отриманий на основі цих однорідних розв'язків (див.[6]):

$$E_\xi = \sum_{p=1}^4 \phi_p(\xi) \int_{\xi_{\min}}^{\xi} W_p(\xi) / W(\xi) d\xi. \quad (6)$$

де $W(\xi)$ - детермінант Вронського, а $W_p(\xi)$ - детермінант, який відрізняється від вронскіана p -м стовпчиком, який замінюється на $\{0, 0, 0, \gamma_m\}$. Тут γ - деякий коефіцієнт, різний для різних складових поля. Повні вирази не наводяться, оскільки вони досить громіздкі. У сумі (6) тільки один доданок відповідає свистовим хвилям, що поширюються в напрямку руху пучка, для яких можливий черенковський резонанс. Таким чином, вираз для поля випромінювання буде являти собою подвійний інтеграл по ξ (внутрішній інтеграл у сумі (6)) та по p (перетворення Фур'є-Беселя). Ці інтеграли обчислювалися методом стаціонарної фази [7], причому умова, з якої знаходилися точки стаціонарної фази, збігається з умовою черенковського резонансу(4).

5. Результати та їх обговорення

Для побудови діаграм спрямованості на основі отриманих виразів для поля випромінювання бралися типові умови іоносферних плазмово-пучкових експериментів: частота модуляції пучка $2 \cdot 10^6$ рад/с, швидкість руху електронів – $3 \cdot 10^8$ см/с. Досліджувався характер діаграми спрямованості при різних значеннях параметрів (рис.3). Як видно, в усіх випадках діаграма спрямованості має багато пелюсток і за своїм характером подібна до просторового спектра пучка. Це пов'язано з тим, що випромінювання відбувається з області з розмірами, значно більшими за довжину хвилі випромінювання.

Розглянемо залежність діаграми спрямованості від радіуса пучка. При великих радіусах, значно більших за довжину хвилі, на поперечних розмірах пучка вкладається велике число довжин хвиль, в результаті чого кількість пелюсток діаграми спрямованості стає ще більшою. Так, якщо порівняти між собою графіки, наведені на рис.3.а-б, добре видно, що із збільшенням радіуса пучка порізаність діаграми спрямованості також збільшується. При таких широких пучках випромінювання зосереджується у вузькому діапазоні кутів. Очевидно, що при необмеженому пучку випромінювання буде відбуватися лише під одним визначеним кутом. Для істотно менших радіусів пучків (15-200 см, ширина пучка менша за довжину

хвилі), на відміну від попереднього випадку, порізаність діаграми спрямованості практично не змінюється.

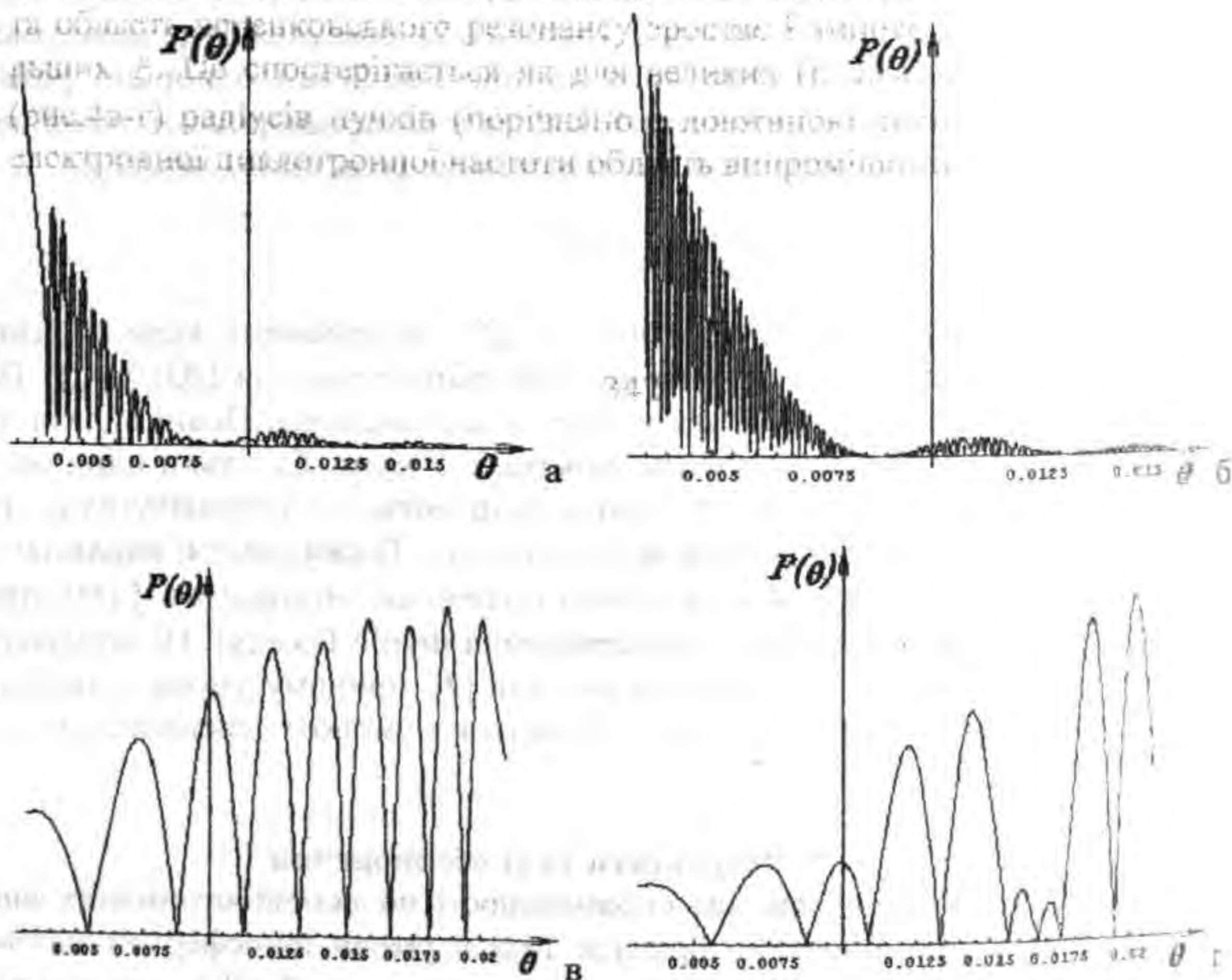


Рис.3. Діаграма спрямованості випромінювання в залежності від радіуса пучка: а $\Omega_c=3$, $r_0=7500\text{м}$; б $\Omega_c=3$, $r_0=15000\text{м}$; в $\Omega_c=3$, $r_0=1.5\text{м}$; г $\Omega_c=3$, $r_0=30\text{м}$.

З порівняння рис.3.в та рис.3.г для проміжного випадку ($r_0=3000\text{см}$) видно, що збільшення радіуса приводить до появи додаткових періодичностей діаграми спрямованості. Це можна пояснити тим, що при досить широкому пучку в області випромінювання в різних напрямках може вклас-тися різна кількість довжин хвиль, чого не спостерігається при малих ши-ринах пучка.

Із збільшенням електронної циклотронної частоти зростає довжина хвилі. Разом з цим частота згрупованих максимумів рис.4а-б збільшується та область черенковського резонансу зростає і зміщується в напрямку більших ξ . Це спостерігається як для великих (рис.4а-б), так і для малих (рис.4в-г) радіусів пучків (порівняно з довжиною хвилі). Із збільшенням електронної циклотронної частоти область випромінювання збільшується.

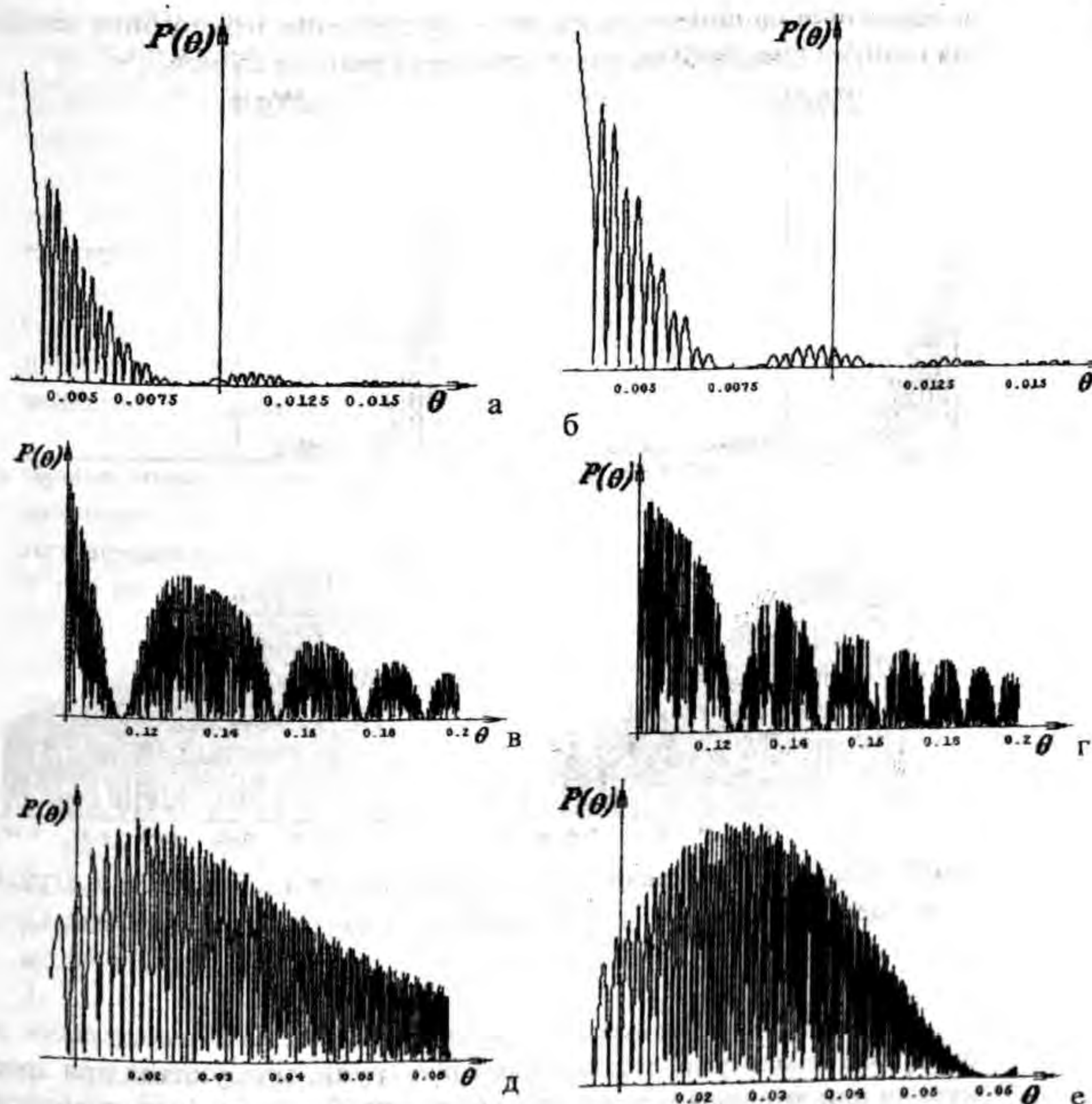


Рис.4. Діаграма спрямованості випромінювання в залежності від магнітного поля: а $\Omega_c=3$, $\gamma_0=7500\text{м}$; б $\Omega_c=4$, $\gamma_0=7500\text{м}$; в $g=120000$, $\Omega_c=3$, $\gamma_0=0.15\text{м}$; г $g=120000$, $\Omega_c=5$, $\gamma_0=0.15\text{м}$; д $g=120000$, $\Omega_c=3$, $\gamma_0=0.15\text{м}$; е $g=120000$, $\Omega_c=5$, $\gamma_0=0.15\text{м}$ (малі кути)

З даних графіків видно, що групи максимумів ущільнюються за рахунок зникнення малих осциляцій з меншими амплітудами. Для великих радіусів ширина менших максимумів не змінюється, а для малих – зменшується із збільшенням частоти, що добре видно, якщо перебудувати рис.4в-г у меншому кутовому діапазоні (див. рис.4д-е).

Розглянемо тепер зміну діаграми спрямованості при зміні градієнта концентрації плазми, який виражається коефіцієнтом g . Із зменшенням цього коефіцієнта область випромінювання збільшується, і спостерігається

ся аналогічне до попереднього випадку згущення згрупованих максимумів для великих (рис.5а-б) та малих (рис.5в-г) радіусів пучків.

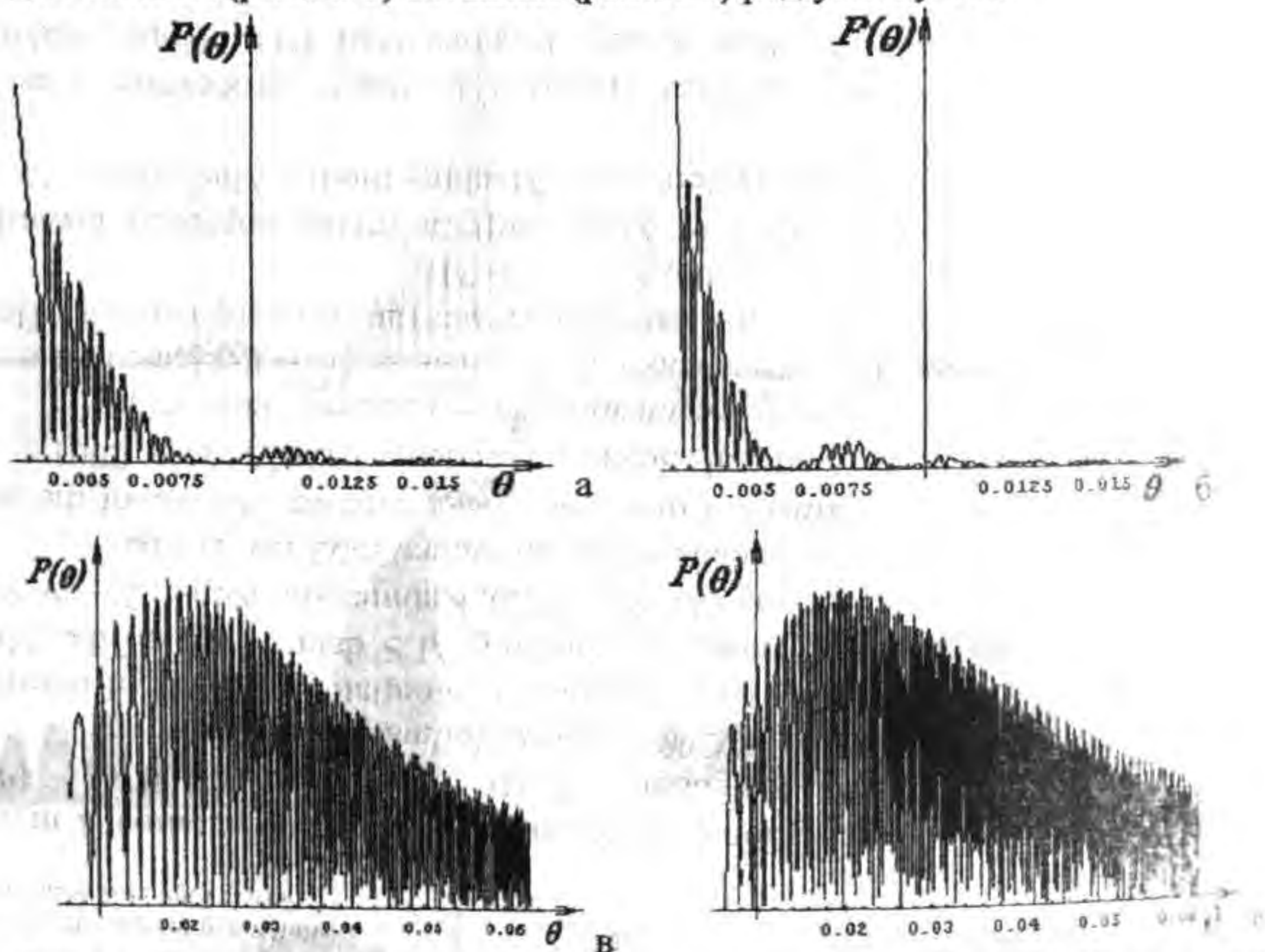


Рис.5. Діаграма спрямованості випромінювання в залежності від градієнта концентрації плазми: а. $g=120000$, $\Omega_c=3$, $r_0=7500\text{м}$; б. $g=60000$, $\Omega_c=3$, $r_0=7500\text{м}$; в. $g=120000$, $\Omega_c=3$, $r_0=1.5\text{м}$; г. $g=60000$, $\Omega_c=3$, $r_0=1.5\text{м}$.

На діаграмах для малих радіусів пучка (рис.5в-г) також добре видно, що дрібні максимуми, так само як і їхні групи, згущуються при зростанні кута та при зменшенні градієнта концентрації плазми (див. також рис.4г). Це пов'язано з розширенням зони випромінювання і збільшенням кількості точок, випромінювання з яких інтерферує. Взагалі ж можна вважати, що кількість згрупованих максимумів визначається тим, скільки довжин хвилі вкладається в довжину області випромінювання.

Були також проведені оцінки повної потужності випромінювання в реліктерів з області черенковського резонансу. Виявилось, що має місце значне (на 1-2 порядки для умов, характерних для плазмово-пучкових експериментів у іоносфері) підвищення ефективності у порівнянні з перехідним випромінюванням на різкій межі плазми. Слід, однак, зазначити, що застосоване у даній роботі наближення заданого струму не дозволяє розраховувати потужність випромінювання досить високої ефективності, оскільки не враховується зворотній вплив такого випромінювання на електронний пучок.

6. Висновки

1. В роботі було обчислене випромінювання вістлерів, збуджене модульованим електронним пучком скінченного радіуса на розмитій межі двох плазмових областей за механізмом черенковського резонансу. Виявилось, що при досить малих градієнтах концентрації (великих поздовжніх розмірах перехідної області) діаграма спрямованості такого випромінювання складається з великої кількості вузьких пелюсток внаслідок інтерференції парціальних хвиль, які збуджуються в різних точках області черенковського резонансу. Зміна параметрів моделі приводить до зміни поздовжніх та поперечних розмірів області випромінювання, і при збільшенні цієї області пелюстки діаграми спрямованості згущуються, так само, як і їхні групи.

2. Ефективність випромінювання модульованого пучка з області черенковського резонансу істотно (на 1-2 порядки для типових умов плазмово-пучкових іоносферних експериментів) перевищує ефективність перехідного випромінювання аналогічного пучка на різкій межі плазмових областей. У той же час розрахунок повної потужності резонансного випромінювання потребує більш точної самоузгодженої моделі, оскільки застосована у даній роботі модель заданого струму не враховує зворотній вплив випромінювання на електронний пучок.

Література

1. Искусственные пучки частиц в космической плазме. / Под ред. Б Гранналя.- М.: Мир, 1985.
2. J. Lavergnat, T. Lehner. Low frequency radiation characteristics of a modulated electron beam in a magnetized plasma// IEEE Trans.-1984.-Vol. AP-32.-#2.-P.177-181.
3. І.О.Анісімов, О.П.Виговська, О.І.Кельник. Перехідне випромінювання модульованого електронного потоку на різкій межі вакуум – анізотропна плазма. // Український фізичний журнал.-2001.-Т.46.-№5.-с.557-566.
4. І.О.Анісімов, О.І.Кельник. Про можливість спостереження вістлерів у активних плазмово-пучкових експериментах в іоносфері. // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки.-1998.-Вип.4.-с.238-242.
5. I.O.Anisimov, O.I.Kelnyk. Whistlers transitional radiation by the modulated electron stream in the weakly inhomogeneous plasma. // Proceedings of the First International Young Scientists Conference on Applied Physics. Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Radiophysics. Kyiv,- 2001.-P.17-18.
6. Э.Камке. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М.: Наука. 1976.- 576с.
7. М.В.Федорюк. Асимптотика: Интегралы и ряды. М.: Наука. 1987.- 544с.

Надійшла до редакції 15.03.2006

УДК 621.383: 537.221

Валерій А. Скришевський¹,
Володимир Г. Літовченко, Микола
І. Клюй, Сергій В. Литвиненко,
Олексій В. Козинець, Олексій І.
Ничипорук

МДН сонячний елемент із затвором з поруватого кремнію та інверсійним шаром

Досліджено можливість викорис-
тання нанокристалічних шарів порува-
того кремнію з вбудованими іонами Cs^+
для створення інверсійної області в со-
нячних елементах МДН типу. Обгово-
рюються технологічний процес форму-
вання елемента. Порівнюються експе-
риментальні параметри таких сонячних
елементів з теоретичними значеннями,
які отримані чисельним моделюванням
за допомогою програми PC1D.

Ключові слова: сонячний елемент,
поруватий кремній, інверсійний шар.

¹ E-mail: skrysh@uninet.kiev.ua

Valeriy A. Skryshevsky¹, Volodymir
G. Litovchenko, Mikola I. Klyui,
Sergiy V. Litvinenko, Olexiy V.
Kozinets, Olexiy I. Nichiporuk

MIS solar cell with porous silicon gate and inversion layer

Application of nanocrystalline
porous silicon layer with incorporated Cs^+
ions to create the inversion channel in
silicon MIS solar cell is proposed. The cell
formation technology is presented. Both the
experimental parameters and numerical
simulated ones by soft package PC1D are
discussed.

Key Words: solar cell, porous silicon,
MIS with inversion layer.

Вступ

Сьогодні широко досліджується нано- та мезо- поруватий кремній з точки зору використання в сонячній енергетиці у якості пасивних антивідбиваючих покриттів [1]. Використання цього матеріалу в якості активних областей сонячних елементів стримується його високим послідовним опором та нестабільністю електричних параметрів з часом. Створення селективних областей з дифузорами з поруватого кремнію [2] чи структур типу метал-діелектрик-напівпровідник з інверсійним шаром [3] дозволяють використати можливості цього матеріалу, як ефективного засобу покращення оптичного захоплення фотонів у сонячних елементах, та одночасно розв'язати проблему послідовного опору.

В загальному випадку сонячних елементів типу метал-діелектрик-напівпровідник інверсійний шар створюється поблизу фронтальної поверхні пластини напівпровідника р-типу, внаслідок введення позитивного заряду в плівку діелектрика. При цьому виникає приповерхневий вигин зон, який дозволяє ефективно колектувати носії, які

генеруються високоенергетичними фотонами сонячного спектра. Крім того, даний тип сонячного елемента на основі кристалічного кремнію є перспективним приладом з точки зору невеликої ціни та простого технологічного процесу [4]. Як правило, для створення інверсійного шару використовується плівка SiO_2 з вбудованими іонами Cs^+ . Беручи до уваги оптичні, електричні та адсорбційні властивості поруватого кремнію, логічним є припустити, що ефективний сонячний елемент означеного типу можна сформувати, використовуючи шар поруватого кремнію з вбудованими позитивними іонами. Дійсно, доведено, що в контакт метал-поруватий кремній-кремній р-типу можна створити потенційний бар'єр 0.8 eV [5]. Крім того, цей матеріал добре адсорбує молекули та іони. Нарешті, поруватий кремній може відігравати роль, як вже зазначалося вище, ефективного антивідбиваючого покриття. В представленій роботі розглядаються теоретичні та експериментальні засади створення таких елементів.

Основні технологічні операції при створенні сонячних елементів типу метал-діелектрик-напівпровідник з інверсним шаром включають: створення анодним травленням тунельно тонкої (2-5 нм) оксидної плівки, напилення Al контактної сітки через маску для формування селективних областей з бар'єрами Шоткі Al-SiO₂-Si, створення омичного контакту на тилі поверхні, створення хімічно (травлення в HF:HNO₃) або електрохімічно (травлення в розчині HF:C₂H₅OH) шару поруватого кремнію, часткове його окислення та обробка у водному розчині CsCl і, на завершальному етапі, низькотемпературний відпал (400° C, 10 хв.). Для стабілізації властивостей поруватого кремнію та збільшення ефективності елемента захисна та антивідбиваюча DLC плівка може наноситися на робочу поверхню такого приладу [6].

Спочатку, за допомогою програми PC 1D, ми визначили вплив вбудованого позитивного заряду на параметри елемента. Параметри кремнієвої підкладки були обрані такими: товщина підкладки 200 мкм, дифузійна довжина неосновних носіїв (електронів) 200 мкм, питомий опір підкладки варіювався від 0.1 до 10 Ом·см – у типових межах, які використовуються в кремнієвих сонячних елементах дифузійного типу; крім того, враховувався p^+ - шар товщиною 3 мкм поблизу тилової поверхні, легований до рівня $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, для створення відштовхуючого поля для неосновних носіїв, а швидкість поверхневої рекомбінації на фронтальній та тилі поверхні задавалася на рівні 10^4 см/сек . Умови освітлення відповідали умовам спектра AM 1.5 та потужності 0.1 Вт/см^2 , коефіцієнт відбиття поруватого кремнію задавався на основі експериментальних даних.

На рис 1 показано залежність величини напруги холостого ходу елемента типу метал-діелектрик-напівпровідник з інверсним шаром від поверхневого заряду для різних величин легування кремнієвої

підкладинки. Як легко бачити, порогове значення фіксованого позитивного заряду, необхідного для виникнення інверсії, змінюється від $N_{Cs}=8 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ при $\rho=10 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ до $N_{Cs}=1.2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$ при $\rho=0.1 \text{ Ом}\cdot\text{см}$. Тобто, для отримання інверсного шару на відносно високоомній підкладці необхідна невелика концентрація іонів Cs^+ , що легко можна реалізувати на практиці. Однак, як і у випадку класичного р-п переходу, напруга холостого ходу більша для більш легованої кремнієвої бази такої структури і змінюється від 565 до 695 мВ при зміні опору підкладинки з 10 до 0.1 Ом·см. Струм короткого замикання змінювався відповідно від 38 до 36 мА/см² (рис.2).

На рис.3 наведені типові експериментальні C-V характеристики для контактів Al-ПК-р-Si до і після вбудови Cs^+ в поруватий кремній. Значення вбудованого позитивного заряду, після обробки в розчині CsCl та низькотемпературного відпалу, можна визначити за величиною зсуву вольт-фарадних характеристик. Величина зсуву складала $Q=4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Тобто, така концентрація вбудованого позитивного заряду дозволяє створювати сонячні елементи з інверсним шаром для кремнієвих підкладок, опір яких оптимальний з точки зору максимального ККД сонячних елементів.

На рис.4 наведено експериментально отриманий розподіл зовнішньої квантової ефективності структури поруватий кремній-кремній з позитивним зарядом, вбудованим у шар поруватого кремнію. Відмітимо невелике зменшення величини зовнішньої квантової ефективності в короткохвильовій області внаслідок поглинання світла в шарі поруватого

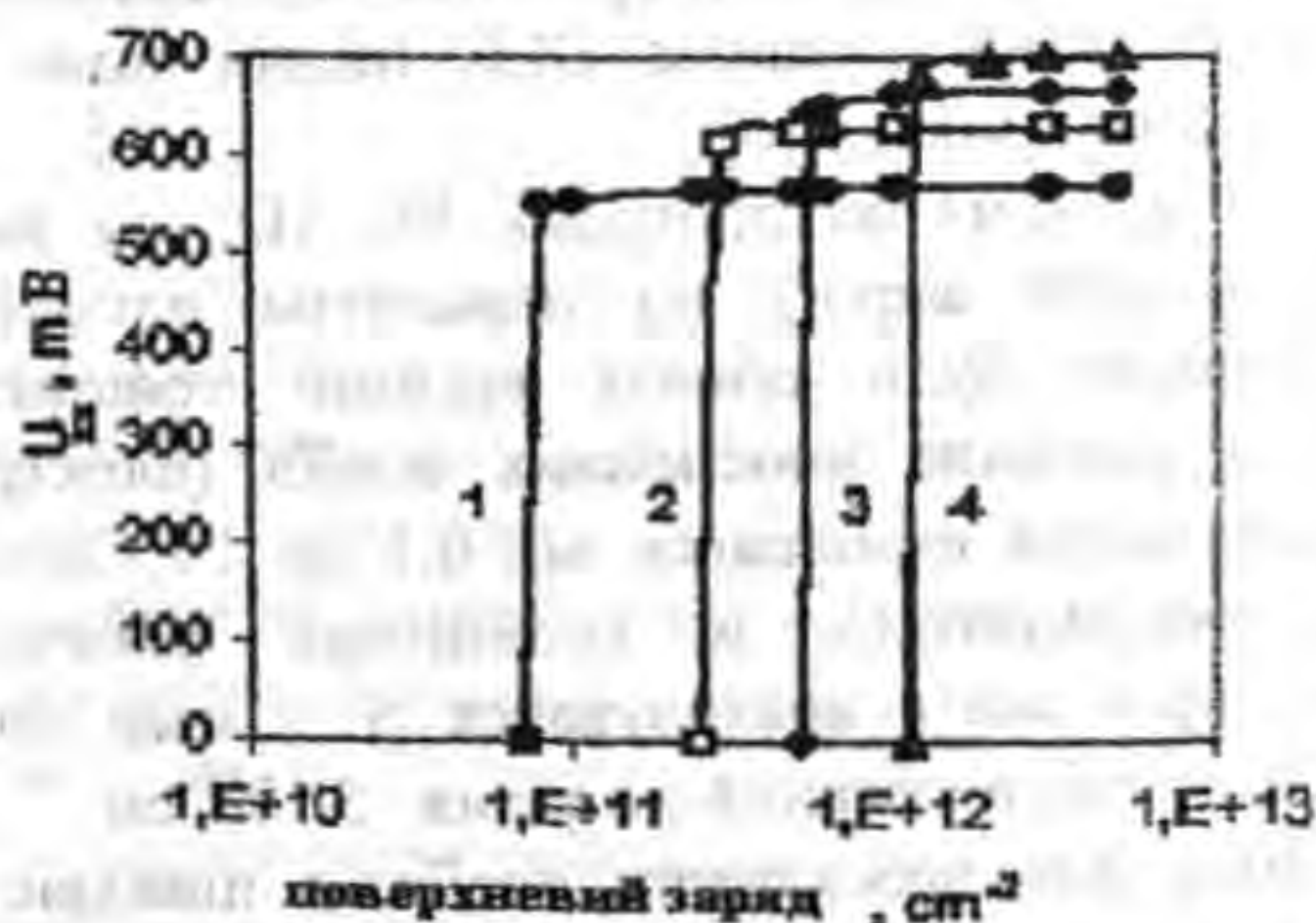


Рис.1. Розраховані залежності напруги холостого ходу від густини поверхневого заряду, вбудованого в шар поруватого кремнію. Питомий опір підкладинки: 1-10, 2-1.0, 3-0.3, 4-0.1 Ом·см.

кремнію. З іншого боку, розсіяння світла в нанокристалітах, з яких утворений поруватий кремній, призводить до зростання ефективного шляху, що його проходить світло в структурі, і, як наслідок, збільшення

зовнішньої квантової ефективності в довгохвильовій області. Прикладання

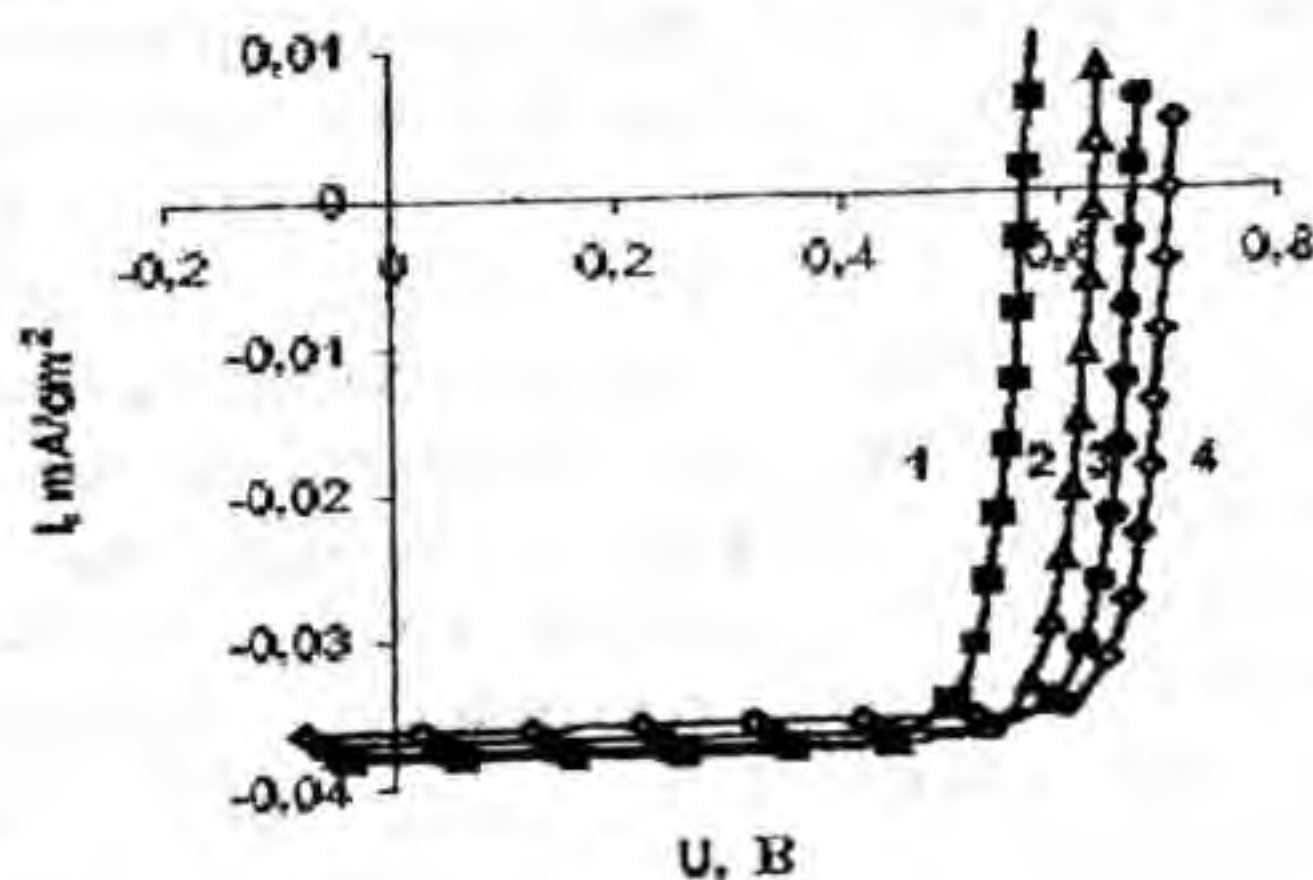


Рис.2. Розраховані світлові вольт-амперні характеристики для структур поруватий кремній-кремній р-типу. Поверхневий позитивний заряд — $4 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

позитивної напруги $U > 0.3 \text{ В}$ до тилового контакту призводить до зникнення інверсії та, відповідно, падіння до нуля величини вбудованого потенціалу. Невелике зростання зовнішньої квантової ефективності при прикладанні негативного зміщення свідчить про необхідність оптимізації

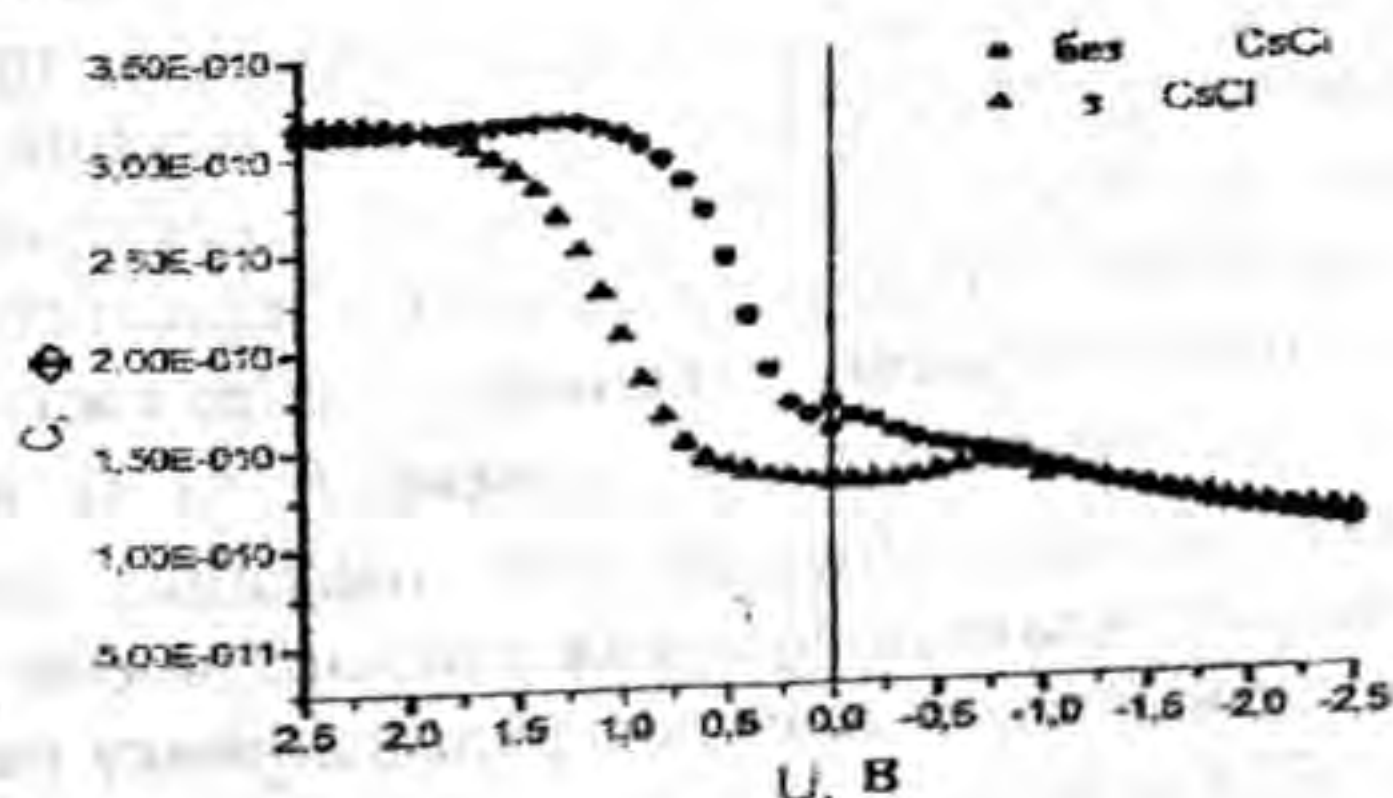


Рис.3. Експериментальні вольт-фарадні характеристики структур з обробкою та без обробки в CsCl.

послідовного опору структури.

Вбудова позитивного заряду Cs^+ у поруватий кремній веде до виникнення поверхневого потенційного бар'єра в кремнії. Важливим питанням залишається однорідність цього бар'єра по площі елемента. Для дослідження цього ефекту вивчався розподіл фотоструму в тестових структурах методом LBIC (струм наведений лазерним променем у певній точці поверхні досліджуваної структури). Тестова структура, на

початковому етапі експерименту, являла кремнієву підкладинку р-типу, на якій було сформовано декілька поверхнево-бар'єрних областей Ti-p-Si, з омичними контактами з шару алюмінію товщиною 1 мкм. У свою чергу, на тилевій поверхні був сформований суцільний омичний контакт. Така структура, подібна до структури сонячного елемента МДН типу, характеризувалася фоточутливістю тільки за периметром Al-Ti-p-Si діодів, що можна пояснити латеральною дифузією фотогенерованих носіїв у напрямку колектуючих бар'єрів, створених на поверхні зарядом, вбудованим у шар поруватого кремнію. Відмітимо, що не спостерігається більш менш значної величини фотоструму від областей, що розміщуються між колектуючими переходами, оскільки розподіл останнього характеризується фактором $\exp(-x/l)$, де x – відстань від краю Ti – контакту, l – довжина дифузії електронів у р-підкладинці.

На наступному етапі створювався шар поруватого кремнію на р-підкладинці з вбудовою позитивного заряду (рис.5). Тепер фотогенеровані носії розділяються в індукованому р-п переході, і “площа” області фоточутливості зростає. Аналізуючи координатний розподіл фотоіндукованого сигналу, необхідно врахувати той факт, що області, де відбувається поглинання світла та колектуються носії, розділені просторово.

Розповсюдження фотовольтаїчного збудження можна тлумачити в термінах еквівалентної схеми з просторово розподіленими параметрами, як то латеральний опір R емітера сонячного елемента, провідність G та ємність р-п переходу C [7]. Математично така ситуація співвідносна із розповсюдженням сигналу в довгих лініях і описується телеграфними рівняннями. В стаціонарних умовах залежність локального фотоструму від координати в одновимірному випадку виражається формулою $U(x) \sim \exp(-\sqrt{RG}x)$, і за умови малих значень R та G відстань, з якої колектуються носії, набагато більша, ніж дифузійна довжина. Взагалі кажучи, необхідно розглядати дифузію неосновних носіїв у паралельному та перпендикулярному освітлюваній поверхні напрямку разом з процесом руху основних носіїв в емітері.

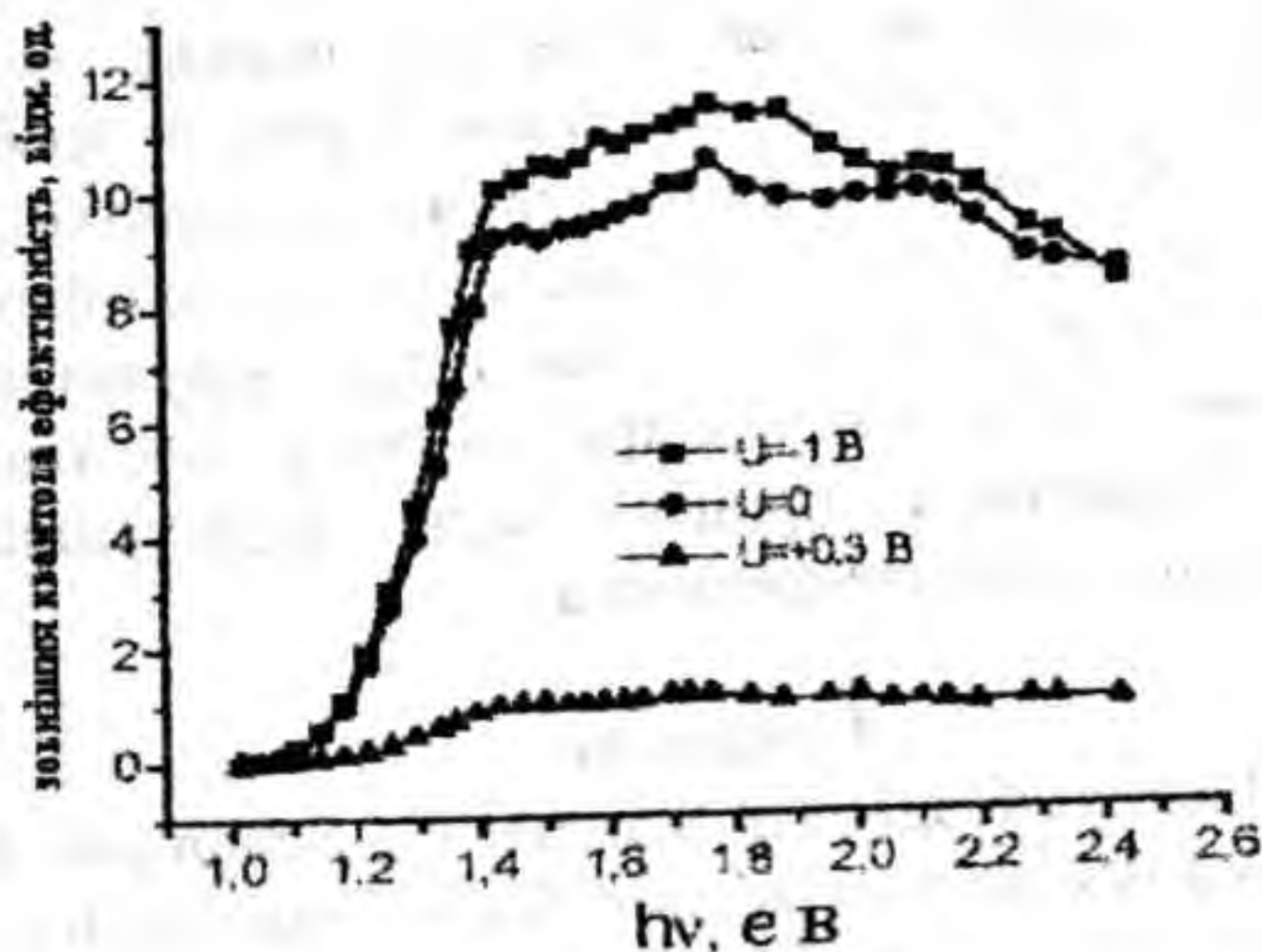


Рис.4. Зовнішня квантова ефективність структур поруватий кремній(Cs^+)-кремній р-кремній для різних напруг.

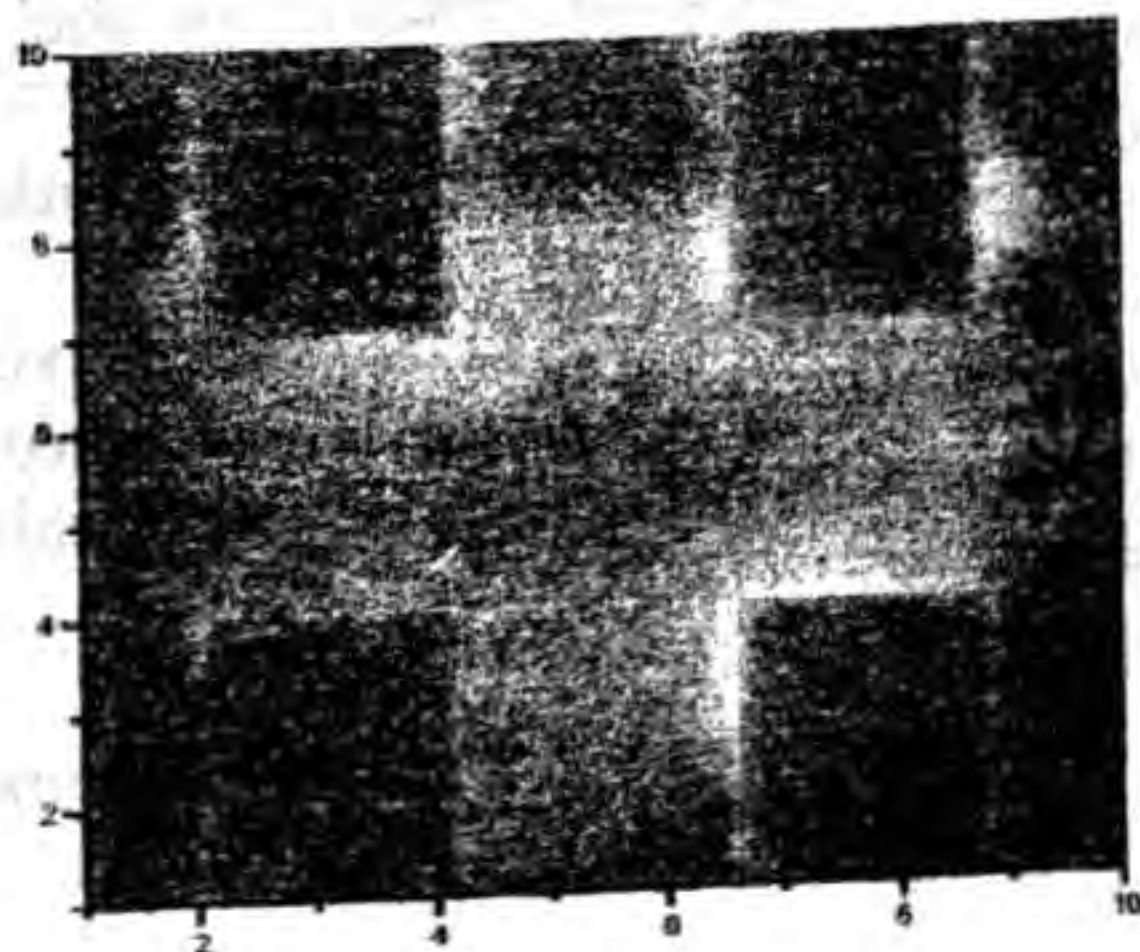
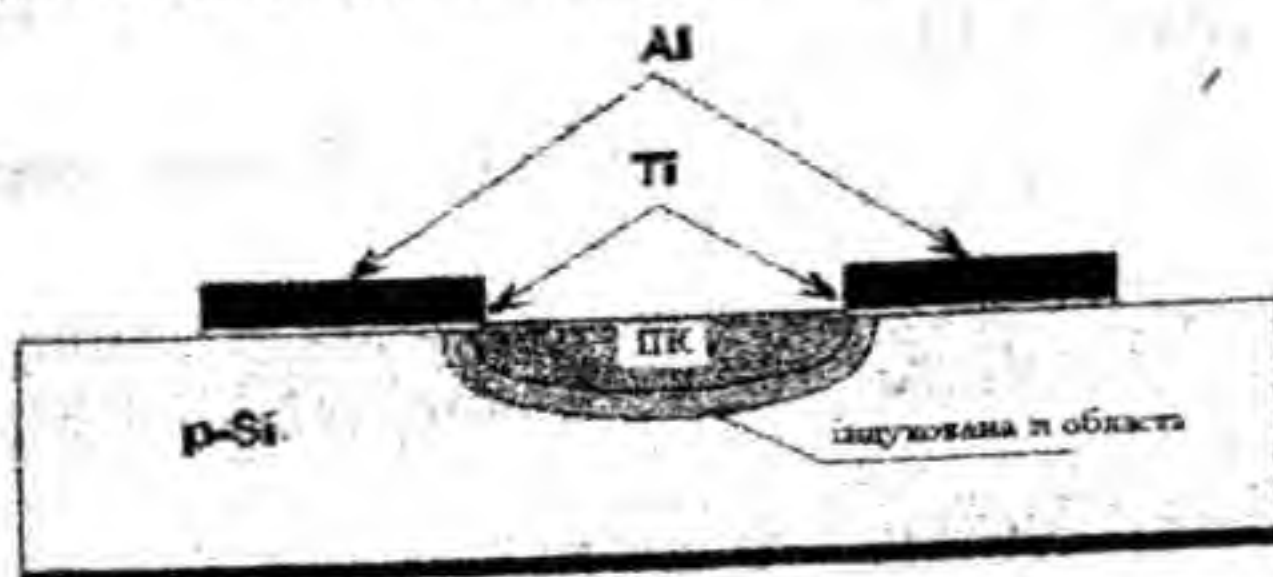


Рис.5. Структура з вбудованими іонами Cs^+ та розподіл фоточутливості по її поверхні, отриманий методом LBIC. Градація сірого пропорційна величині наведеного струму, білі області відповідають максимальному фотоструму.

Однак, наші дослідження показали, що, в умовах сильної інверсії, дифузія неосновних носіїв не має значного впливу на координатну залежність фотоструму. Тим не менше, з рис.5 можна зробити висновок про неоднорідність величини наведеного струму по поверхні.

Таким чином, показано принципову можливість створення сонячного елемента шляхом вирощування шару поруватого кремнію із наступною вбудовою іонів Cs^+ . Запропонована технологія дозволяє уникнути фотолітографічного процесу при формуванні контактної гребінки на фронтальній поверхні елемента.

Література

1. Bilyalov R.R, Lautenschlager H., Schetter C., Schomann F., Schubert U., Schindler R. Porous silicon as an antireflection coating for multicrystalline silicon solar cells// Proc. 14th European Photovoltaic Solar Energy Conf.-Barcelona.-1997.-P.788-791.
2. V.A. Skryshevsky, S.S Kilchitskaya, T.S. Kilchitskaya, S.V. Litvinenko, A.I. Nechiporuk, A.Fave, A.Laugier //Proc. 16th European PV Solar Energy Conf., Glasgow (2000) 1634.
3. V.A. Skryshevsky //Proc. 2nd Int.Conf. Porous semiconductors and technology, Madrid (2000) 178.
4. H.Neuhaus, B. Kuhlman, R.Meyer, A.Metz, R. Auer, A.G. Aberle, R. Hezel //Proc. 2nd World Conf. Photovoltaic Sol. Energy Conv., Wien(1988) 194.
5. V.A. Vikulov, V.I. Strikha, V.A. Skryshevsky, S.S. Kilchitskaya, E. Souteyran, J.-R. Martin. Electrical features of the metal-thin porous silicon-silicon structures // Appl. Phys.Lett.-2000.-v.33.-P.1957-1964.
6. V.G. Litovchenko, N. I. Klyui //Solar Energy Materials & Solar Cells, 68 (2001) 55.
7. І.О.Анісімов, С.О.Коленов, С.В.Литвиненко. Поширення фотоелектричного збудження у Р-Н переходах з великою площею//Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. 2002, 2, с.291-298.

Надійшла до редколегії 14.03.2006

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 534.222.2

Байдулаєва А., канд. фіз.-мат. наук,
старший науковий співробітник
Велешук В.П., аспірант
Власенко О.І., доктор фіз.-мат.
наук, професор
Ляшенко О.В., канд. фіз.-мат. наук,
доцент
Мозоль П.О., доктор фіз.-мат.
наук, професор

A. Baidullaeva, Ph. D., senior
researcher
V.P. Veleschuk, post-graduate stud.
A.I. Vlasenko, doctor sciences,
professor
O.V. Lyashenko*, Ph. D., senior
lecturer
P.E. Mozol, doctor sciences,
professor

**Визначення порогу плавлення
CdTe по акустичному відгуку
при лазерному імпульсному
опроміненні**

**Definition of a melting threshold of
CdTe monocrystal at a laser
pulsing radiation by means the
ultrasonic signal**

В роботі встановлено поріг
плавлення монокристалічного CdTe при
імпульсному лазерному опроміненні по
амплітуді акустичного відгуку.

In paper established melting
threshold of CdTe monocrystal at a pulsing
laser radiation by means ultrasonic
response amplitude.

Ключові слова: поріг плавлення,
CdTe, лазерне опромінення.

Key Words: melting threshold, CdTe,
laser irradiation.

Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАНУ
*Київський національний університет ім. Т.Шевченка, фізичний факультет
E-mail: Veleschuk@univ.kiev.ua

У зв'язку з широкими перспективами застосування імпульсних
лазерних технологій для створення приладних структур оптоелектронної
та сенсорної техніки на основі складних напівпровідникових матеріалів
важливою є задача точного визначення порогових режимів їх
лазерностимульованого плавлення [1-3].

В даній роботі визначено поріг поверхневого плавлення
монокристалічного CdTe при наносекундному лазерному опроміненні по
зміні амплітуди акустичного відгуку. Експеримент виконувався по
методиці [4,5] - зразок на кварцевій підкладці знаходився в акустичному
контакті з п'єзоперетворювачем. Кристали CdTe орієнтації (111) та (110) а
також полірований кремній опромінювались рубіновим лазером з $\hbar\omega =$
1.78 еВ і $\tau_{imp} = 20$ нс., лазерне випромінювання поглиналось в
приповерхневому шарі (коефіцієнт поглинання $\alpha = 2.94 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$ для CdTe та
 $2.4 \cdot 10^5 \text{ м}^{-1}$ для Si). Сумарний коефіцієнт підсилення електричних сигналів
апаратурою становив 70 дБ, частотний діапазон реєстрації 200 – 2000 кГц.

Поріг чутливості апаратури для реєстрації акустичного відгуку складав $0,1 \text{ МВт/см}^2$.

На рис.1 наведений типовий акустичний сигнал при опроміненні кристалу. Час від початку розгортки до початку сигналу відповідає часу поширення повздовжньої хвилі від місця збудження до п'єзодатчика. На вставці показано затухання сигналу при багатократному поширенні через звукопровід.

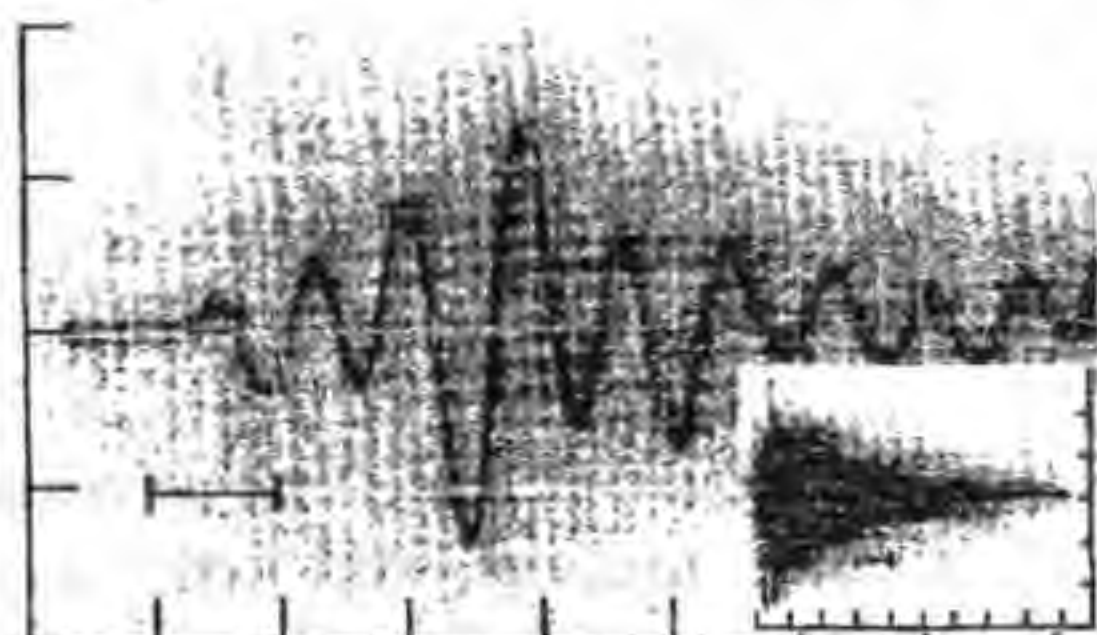


Рис.1. Акустичний сигнал при опроміненні кристалу CdTe .
 $I=3,3 \text{ МВт/см}^2$, $U=0,5 \text{ вольт/под.}$,
 $\tau=2 \text{ мкс/под.}$
(На вставці $\tau=20 \text{ мкс/под.}$)

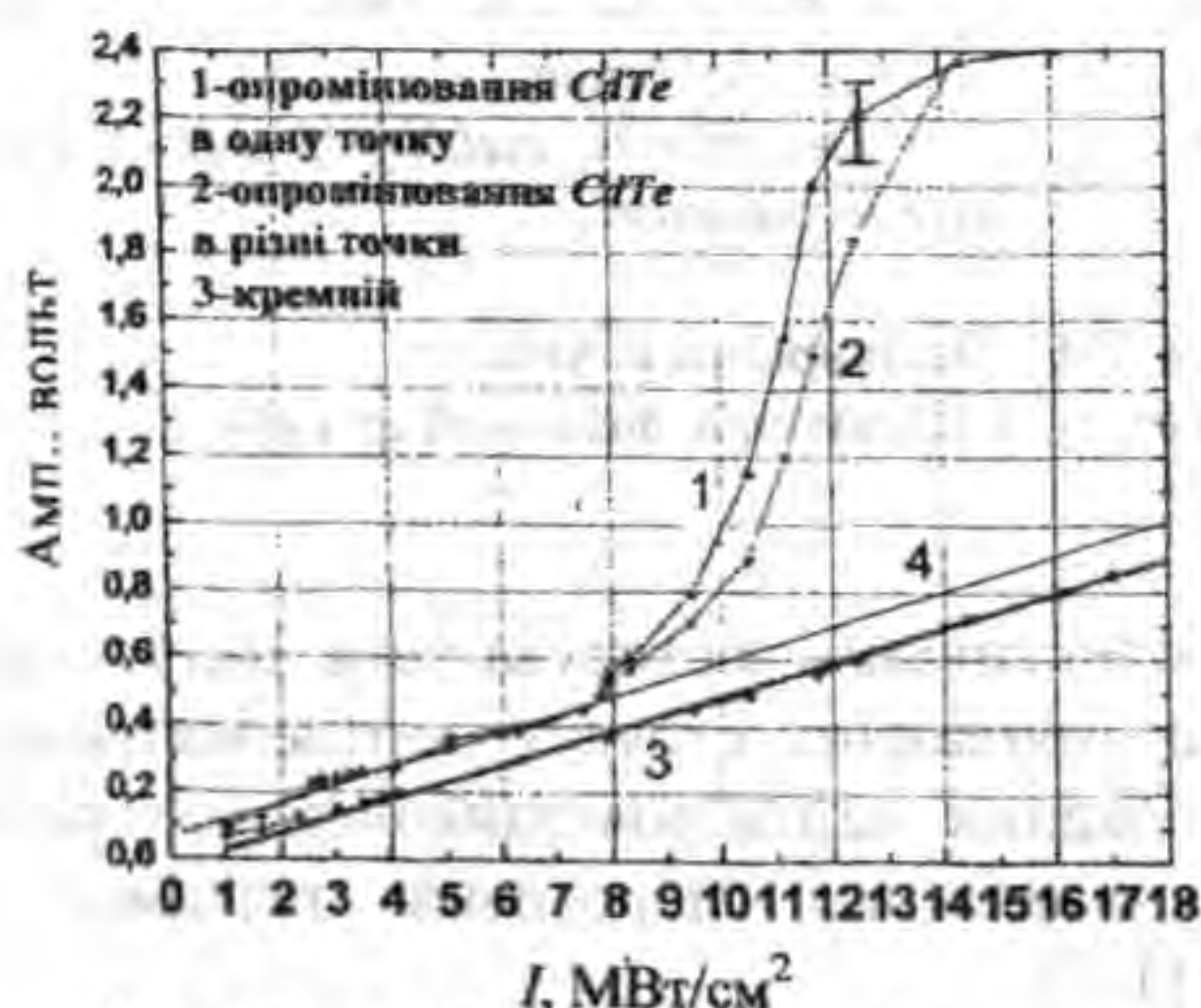


Рис.2. Залежність амплітуди акустичного сигналу від інтенсивності лазерного імпульсу.

опромінення зразка в одну і ту ж точку кристалу (крива 1 рис.2) амплітуда акустичного сигналу залежить від стану приповерхневого шару після попереднього опромінення [6,7]; зокрема після досягнення порогу плавлення при опроміненні складних напівпровідників зростає стаціонарний коефіцієнт поглинання [6]. Вірогідно, що саме тому при опроміненні в одну і ту ж точку кристалу амплітуда відгуку при сталому I є більшою (крива 1 рис.2), аніж у випадку опромінення зразка в різні точки

На рис.2 наведено залежності амплітуди A акустичного сигналу (відгуку) від інтенсивності (I) лазерного опромінення. Відомо, що акустичним відгуком при імпульсному лазерному опроміненні в лінійній області до 7 МВт/см^2 є фототермоакустичний (ФТА) сигнал [4,5]. В цьому випадку відсутнє плавлення поверхні. В області $8-12 \text{ МВт/см}^2$ залежність $A(I)$ є нелінійною, а саме - спостерігається стрибок амплітуди акустичного сигналу та її подальша зміна за експоненціальним законом (криві 1, 2 рис.2). Це звичайно пояснюється наявністю додаткових механізмів акустичного випромінювання.

Лінією 4 відмічено лінійну апроксимацію значень амплітуди сигналу для малих I при опроміненні CdTe . Її перетин з початком експоненційної залежності $A(I)$ (криві 1 та 2) визначає поріг плавлення - 8 МВт/см^2 .

Відомо, що у випадку

(крива 2 рис.2). Крім того, внаслідок зміни морфології поверхні (рис.3) у поглинанні випромінювання задіяна більша частина поверхні.

Очевидно, що при опроміненні кристалу в одну і ту ж точку після циклічного плавлення-застигання локальної області всі фізичні величини, що характеризують дану речовину, в певному okolí цієї локальної області змінюються. Зокрема змінюються тепло- та температуропровідність, коефіцієнти відбивання та розширення, внаслідок локально діючих пружних та пластичних залишкових напружень та деформацій з'являються дислокації розвантаження, лінії яких орієнтовані під кутом 60° один до одного (рис.3 б).

При збільшенні інтенсивності світлового потоку до $I=14 \text{ МВт/см}^2$ та більше ріст амплітуди акустичних імпульсів сповільнюється через збільшення концентрації парів CdTe над поверхнею, їх іонізації та поглинання парами лазерного випромінювання. Крім того, поверхня розплаву теж відбиває частину випромінювання і тому зростає нестационарний коефіцієнт відбиття. Для порівняння при опроміненні полірованого кремнію (крива 3 рис.2) залежність $A(I)$ до $I = 20 \text{ МВт/см}^2$ була лінійною, а ушкодження чи наслідки розплаву на поверхні були відсутні. Це вказує, що формування акустичного відгуку визначалося ФТА ефектом. Плавлення поверхні кремнію було зафіксоване лише при 50 МВт/см^2 . Велике значення порогу плавлення кремнію пов'язано з більшою ніж у CdTe температурою його плавлення, більшою теплоємністю та меншим коефіцієнтом поглинання.

Слід відмітити, що контроль порогу плавлення по появі плазми – діелектричного пробою в парах речовини, що інтенсивно випаровується при температурі $T \geq T_{\text{плава}}$ з розплаву над поверхнею кристалу [8] утруднений існуванням малоінтенсивної плазми ще до порогу плавлення. Слабке зростання світіння плазми в CdTe було зареєстровано при 7.9 МВт/см^2 .

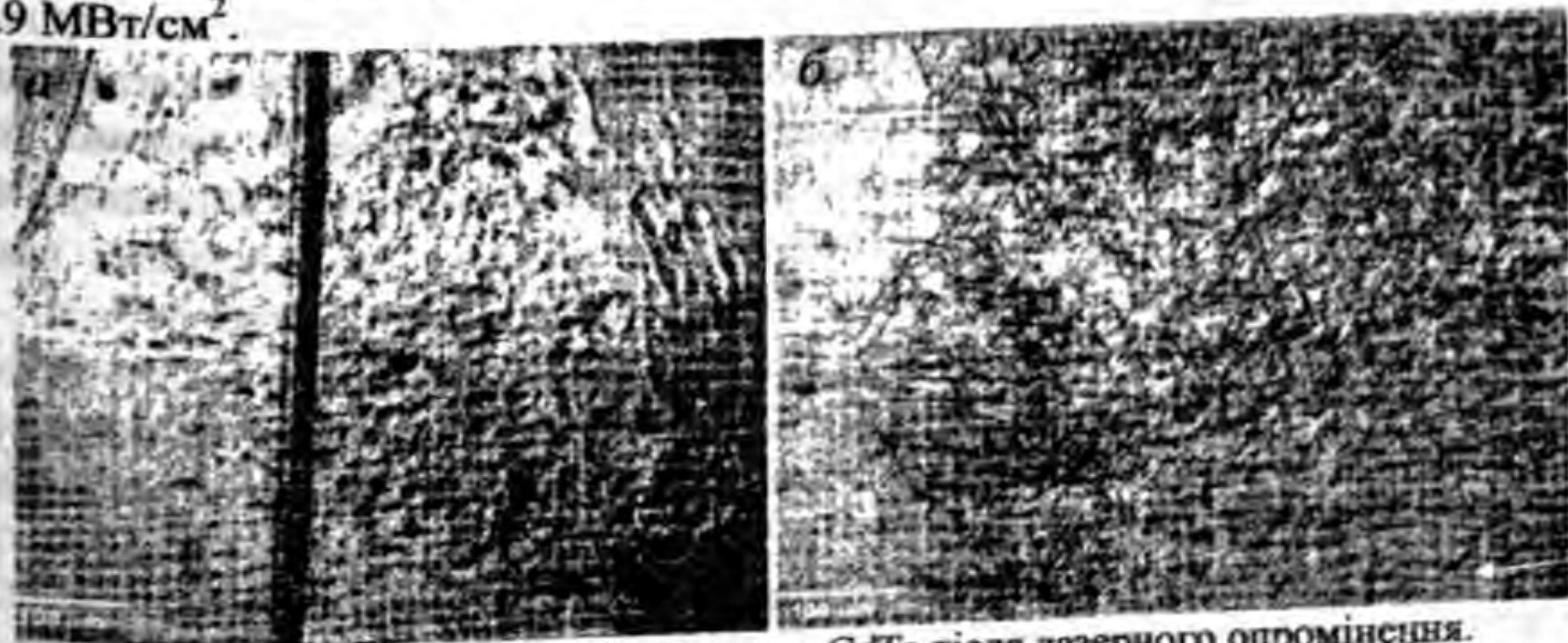


Рис.3. Поверхня грані (111) кристалу CdTe після лазерного опромінення.
а – 10 МВт/см^2 , б – 16 МВт/см^2 .

З рис.3 видно, що ефекти локального приповерхневого плавлення на грані (111) кристалу CdTe призводять до зміни морфології вихідної

поверхні кристалу (рис.3,а) і до утворення сітки дислокацій (рис.3,б), що утворились в кристалі внаслідок зняття термопружних напруг при великих часових $(55-100) \cdot 10^9$ К/сек. та просторових $(1-2) \cdot 10^4$ К/см. градієнтах температур. Лунки (рис.3,а) утворилися за рахунок реактивної дії парів на розплав.

Залежність густини твердої фази $CdTe$ від температури описується співвідношенням $\rho(T) = 5.887 - 0.1165 \cdot 10^{-3} \cdot T$, г/см³, а розплавленої фази – $\rho(T) = 6.158 - 0.3622 \cdot 10^{-3} \cdot T$, г/см³ [1], рис.4. Температура плавлення $CdTe$ 1366.6 К [1]. При співставленні залежностей $\rho(T)$ на рис.4 та $A(I)$ на рис.2

видно їхню схожість – особливий стрибок густини та амплітуди при плавленні $CdTe$.

Об'єм області опромінення $CdTe$ $S_{опром} (1/\alpha)$ спочатку лінійно зростає з ростом інтенсивності, а потім стрибає та змінюється по іншому лінійному закону, тобто зміна об'єму області опромінення, що поглинув випромінювання і відповідно зміщення при переході тверде тіло-рідина та рідина-тверде тіло в 1,5-2,5 рази більші, ніж при ФТА ефекті. Зміщення на лінійній ділянці при термічному

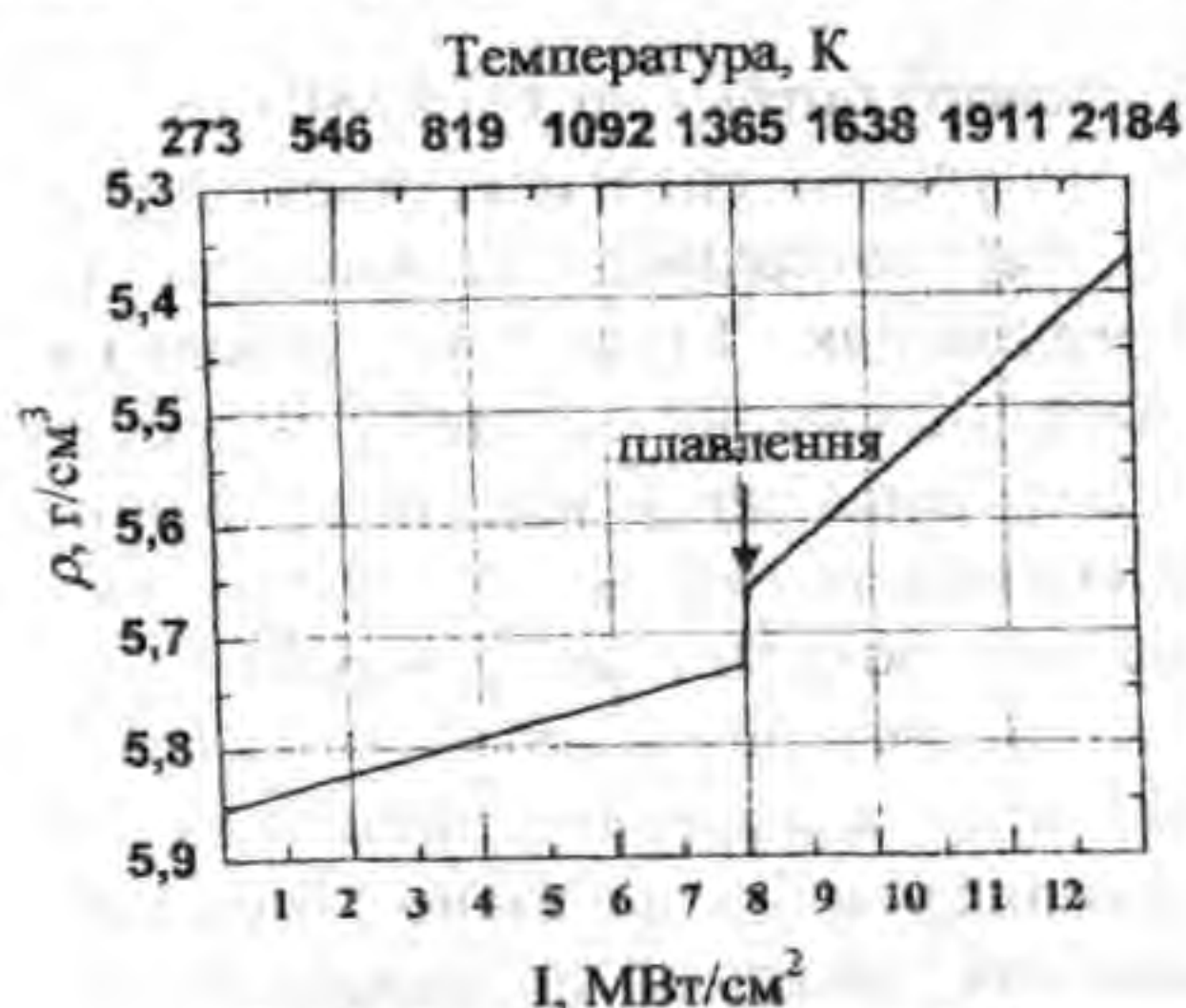


Рис.4. Залежність $\rho(T)$ для $CdTe$

розширенні речовини $\Delta l = \alpha \cdot \Delta T$ прямо пропорційне температурі та інтенсивності (рис.2 та 4). Після 8 MWt/cm² експоненційний характер залежності $A(I)$ пояснюється додатковим акустичним випромінюванням.

До механізмів, що дають додатковий вклад в амплітуду акустичного сигналу, відносяться:

– Акустична емісія (АЕ) – випромінювання внутрішніх спонтанних акустичних хвиль шумового характеру при локальній динамічній перебудові структури твердого тіла, що супроводжується утворенням та зривом механічних напружень у локальних об'ємах [10], зокрема при тріщиноутворенні (рис.3,б) та при фазових перетвореннях тверде тіло – рідина (плавлення) та рідина – тверде тіло (кристалізація) в монокристалах при імпульсному лазерному опроміненні [4,10]. Час існування розплаву при наносекундному опроміненні – до 400 нс. та є функцією потужності імпульсу лазера [4,6,8,9].

– Збудження акустичного імпульсу при раптовому розширенні – звуженні речовини при зміні агрегатного стану. Можливий перехід акустичного імпульсу в ударну хвилю [2,6,8]. Відомо, що процеси

фазового переходу при лазерному опроміненні на порядок збільшують амплітуду акустичного відгуку [8].

– Імпульс віддачі утворених парів над поверхнею розплаву при досягненні порогу плавлення [2,8,10] (див. лунки на рис.3,а та 3,б-вказано стрілкою).

– Імпульс віддачі при випаровуванні речовини товщиною в декілька атомних шарів до порогу плавлення [8].

– Так званий світлодетонаційний тиск від спалаху плазми над поверхнею зразка.

З усіх вище перелічених механізмів при даних інтенсивностях лише два останні не дають суттєвого внеску в сумарний тиск в зоні лазерного збудження. Таким чином, при досягненні плавлення під впливом лазерного імпульсного опромінення стрибок амплітуди акустичного сигналу пояснюється різкою зміною об'єму. Експоненційний характер залежності $A(I)$ після 8 МВт/см^2 пояснюється додаванням сигналів від різкої зміни об'єму, акустичної емісії при плавлення-кристалізації та тріщиноутворенні; від реактивної дії парів. Насичення на залежностях $A(I)$ пояснюється екрануванням парами речовини з поверхні розплаву лазерного випромінювання та ростом нестационарного коефіцієнту відбивання.

Висновки

Встановлено, що поріг плавлення монокристалічного CdTe при опроміненні імпульсами рубінового лазера наносекундної тривалості відповідає інтенсивності опромінення $8 \pm 0,4 \text{ МВт/см}^2$.

Виявлено, що під час існування розплаву на поверхні при наносекундному лазерному опроміненні, який складає десятки-сотні наносекунд, плавлення та кристалізація супроводжуються випромінюванням сигналів АЕ, що реєструються на фоні ФТА та інших сигналів, амплітуди яких при вибраних інтенсивностях опромінення перевищують амплітуду сигналів АЕ. Час загасання акустичного сигналу становить сотні мікросекунд, що значно перевищує характерний час плавлення та кристалізації при імпульсному лазерному опроміненні.

Встановлено, що при опроміненні кристалів наносекундними імпульсами лазера надпорогової потужності випромінювання сигналів акустичної емісії при утворенні дислокацій та мікротріщин відбувається на фоні інших акустичних сигналів, що призводить до труднощів в їх реєстрації. Реєстрація АЕ можлива лише при певному значенні енергії лазерного імпульсу, при якій час рекристалізації розплаву в локальній області на поверхні кристалу буде більшим за час загасання акустичних сигналів від згаданих раніше процесів, оскільки час затримки виникнення АЕ визначається зокрема і часом відтоку запасеного тепла розплавом локальної області у інші непрогріті області.

Автори висловлюють подяку за цінні зауваження та обговорення Біляєву С.В.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Жвавий С.П., Зыков Г.Л. Численное моделирование динамики фазовых переходов в $CdTe$, инициируемых наносекундным излучением эксимерного лазера. // *ФТП* – 2006. – Т. 40, №6. – с.652–655.
2. Артамонов В.В., Байдуллаева А., Власенко А.И., Вуйчик Н.В., Литвин О.С., Мозоль П.Е., Стрельчук В.В. Атомно-силовая микроскопия и рамановское рассеяние света лазерно-индуцированного разупорядочения на поверхности p - $CdTe$. // *ФТП* – 2004. – Т. 46, №8. – с.1489–1493.
3. Головань Л.А., Кашкаров П.К., Лакеев В.М., Тимошенко В.Ю. Влияние импульсного лазерного облучения на оптические характеристики и фотопроводимость твердых растворов $CdHgTe$ // *ФТП* – 1997. – Т. 37, №8. – с.931–935.
4. Блонский И.В., Тхорик В.А., Цицилиано А.Д. Акустическая эмиссия в процессе лазерного отжига монокристаллов кремния. // *ФТП* – 1997. – Т. 39, №3. – с.505–509.
5. Жаров В.П., Летохов В.С. Лазерная оптико-акустическая спектроскопия. Москва: Высшая школа, 1984. – 320с.
6. Карпов С.Ю., Ковальчук Ю.В., Погорельский Ю.В. Плавление полупроводников под действием импульсного лазерного излучения. Обзор. // *ФТП* – 1986. – Т. 20, №11, – с.1945–1969.
7. Баценок С.Н., Блонский И.В., Бродин М.С., Кадан В.Н., Скрипчевский Ю.Г. Влияние УФ облучения на температурную зависимость и фотоакустический отклик пористого кремния. // *ЖТФ* – 2001. – Т. 71, №1. – с.66–70.
8. Чабанов В.Е. Лазерный ультразвуковой контроль материалов. – Ленинград: ЛПИ. 1986. – 320 с.
9. Ивлев Г.Д., Гацкевич Е.И. Фазовые превращения, инициируемые в тонких слоях аморфного кремния наносекундным воздействием излучения эксимерного лазера // *ФТП* – 2003. – Т.37, №5. – с.622–628.
10. Ермолов И.Н., Алешин Н.П., Потапов А.И. Неразрушающий контроль. Акустические методы контроля // Москва: Высшая школа, 1991. – 283 с.

Надійшла до редколегії 26.06.2006

УДК 519.9

Боровий М.О., доцент
Іщенко Р.М., аспірант
Степаніщев М.Б., інженер

Рентгенівські емісійні $M\alpha$ - та $M\beta$ - спектри кратноіонізованих атомів Au

Запропоновано модель рентгенівської M -емісії, яка враховує основні канали генерації та міграції вакансій в середині M -оболонки. Отримано рівняння, що дозволяють розрахувати відносні інтенсивності $M\alpha_S$ - та $M\beta_S$ -сателітів (S_α , S_β). Для елемента Au проведено експериментальне дослідження величин S_α , S_β при збудженні M -спектрів поліхроматичним випромінюванням рентгенівських трубок БХВ-12 з Cr та Cu анодами. Виявлено, що експериментальні та розраховані значення величин S_α , S_β у межах похибки практично співпадають. Зроблено висновок, що запропонована модель коректна для опису рентгенівської M -емісії в елементах $Z > 70$.

Ключові слова: M -спектр, модель рентгенівської M -емісії.

Borovoy M.O., Ph. D.
Ischenko R.M., post-graduate
Stepanischev M.B., engineer

X-ray emission $M\alpha$ - and $M\beta$ - spectra of multiionized Au atoms

The model of X-ray M -emission, which takes into account major generation and migration channels of vacancies in M -shells has been proposed. The equations, which allow to determine a relative intensities of $M\alpha_S$ - and $M\beta_S$ -satellites (S_α , S_β) are received. The experimental investigation of a relative intensities S_α , S_β for Au has been performed by excitation of M -spectrum due to polychromatic radiation from BHV-12 X-ray tubes with Cr and Cu anods. It is revealed, that experimental and calculated values of S_α , S_β in borders of an error practically coincide. Thus, the suggested model is correct for the description of M -emission in elements $Z > 70$.

Key Words: M -spectrum, model of X-ray M -emission.

E-mail: borovoy@univ.kiev.ua; rm_ischenko@ukr.net

Відомо, що пряма іонізація M_i -підоболонки ($i=1 \div 5$) атома частинкою, що налітає, може супроводжуватися радіаційним розпадом створеної вакансії з випромінюванням відповідної діаграмної лінії M -серії, наприклад, $M\alpha_{1,2}$ - (перехід $M_5-N_{6,7}$), $M\beta$ - (M_4-N_6), $M\gamma$ - (M_3-N_5) лінії. Однак у випадку, якщо енергія такої частинки достатня для іонізації більш глибоких M_i -підоболонок, створення M_i -вакансії ($i \neq 1$) може відбуватися і внаслідок процесів двократної іонізації, пов'язаних з переходами Костера-Кроніга типу M_i-M_jN та M_i-M_jX ($X=O, P$). Внесок таких процесів у повний переріз генерації M_i -вакансії є досить значним [1-3]. Результатом КК-переходів та їх каскадів є стани з однією чи декількома додатковими

вакансіями в N-, O- або P- оболонках. Радіаційний розпад M_1 - вакансії у присутності N-, O- або P- вакансій призводить до випромінювання сателітних ліній, які формують разом з відповідною рентгенівською емісійною лінією повний спектральний $M\alpha$ - або $M\beta$ - контур [4-7]. Важливо відзначити, що для $M\alpha_{1,2}$ - та $M\beta$ - ліній, що випромінюються атомами важких елементів ($Z > 70$), групи переходів $M_5N-N_{6,7}N$ і M_4N-N_6N (M_5N - і M_4N - сателіти) відділені на $(5 \div 9)$ еВ від відповідних $M\alpha_{1,2}$ - і $M\beta$ - ліній, тоді як для переходів $M_5X-N_{6,7}X$ і M_4X-N_6X (M_5X - і M_4X - сателіти) такі зсуви не перевищують $(1 \div 2)$ еВ [4]. Це означає, що для цих елементів відповідні M_5N - і M_4N - сателіти, на відміну від M_5X - і M_4X - сателітів, принципово можуть бути виділені з повних $M\alpha$ - і $M\beta$ - контурів.

Відомо ряд робіт, у яких експериментально вимірювалися інтегральні інтенсивності $M\alpha_{1,2}$ -, $M\beta$ - та $M\gamma$ - ліній важких елементів при різних умовах збудження. Наприклад, при фотопоглинанні (досліджувані елементи $70 \leq Z \leq 92$) [4], бомбардуванні α - частинками (Ta $\div$ Th) [5], протонному ударі (Hg) [6], бомбардуванні іонами F^{8+} , C^{5+} , Li^{3+} , H^+ (Au) [7]. Отримані значення інтенсивностей, як правило, порівнювалися з результатами розрахунків $M\alpha_{1,2}$ -, $M\beta$ - та $M\gamma$ - рентгенівських перерізів генерації, у яких враховувалися КК- переходи типу M_i-M_jN і M_i-M_jX та їхні каскади. Однак, виділення M_5N - і M_4N - сателітів з повних $M\alpha$ - і $M\beta$ - контурів в [4-7] не проводилось. Відносні інтенсивності таких сателітних груп окремо не розраховувалися. У той же час, використання відносних інтенсивностей виділених короткохвильових сателітів розширює число рівнянь, що описують інтенсивність рентгенівської M- емісії, надаючи більше інформації для такого опису. Наприклад, у випадку L- серії, врахування відносних інтенсивностей L_3M_5 - сателітів $L\beta_2$ - ліній дозволило нам у попередній роботі [8] визначити парціальні ширини L_1 - рівнів, пов'язаних з КК- переходами типу $L_1-L_3M_5$ в атомах елементів $W = Pt$.

Таким чином, у даній роботі запропоновано модель опису інтенсивностей ліній рентгенівської M- емісії в атомах важких елементів $Z > 70$, яка враховує найбільш важливі канали генерації і міграції вакансій в M-підоболонках та застосовано її для визначення відносних інтенсивностей M_5N - та M_4N - сателітів. Для елемента Au проведено експериментальне дослідження відносних інтенсивностей M_5N - і M_4N - сателітів при збудженні M- спектрів поліхроматичним випромінюванням рентгенівських трубок типу БХВ-12 з Cr та Cu анодами. Проведено порівняння отриманих експериментальних значень відносних інтенсивностей M_5N - і M_4N - сателітів Au з даними розрахунків, виконаних у рамках запропонованої моделі опису інтенсивностей ліній рентгенівської M-емісії.

Розглянемо окремі групи $M\alpha_5$ - сателітів, які являють собою радіаційні переходи типу $M_5-N_{6,7}$ у присутності однієї додаткової вакансії

у N_k - підоболонках ($k=1\div 7$). Для таких груп сателітів початковими є M_5N_1 , M_5N_2 , M_5N_3 , M_5N_4 , M_5N_5 та $M_5N_{6,7}$ двократно іонізовані стани. Надалі будемо використовувати такі позначення: $P_i^{N_k}$ – ймовірність процесу, при якому поява вакансії в i - підоболонці ($i=M_1\div M_5$) супроводжується ежекцією одного з N_k - електронів за рахунок SO- процесу; f_{ijN_k} – вихід КК- переходу типу $M_i-M_jN_k$, у якому вакансія переходить з M_i до M_j - підоболонки ($j>i$), а один з N_k - електронів вилітає з атома; $\omega_{M_iM_j}$ – вихід флуоресценції для радіаційного переходу M_i-M_j ; σ_{M_i} – переріз фотоіонізації M_i - підоболонки; $\Gamma(\alpha_{1,2})$ – парціальна ширина M_5 - рівня, що відповідає радіаційному переходу типу $M_5-N_{6,7}$; $\Gamma(\beta)$ – парціальна ширина M_4 - рівня, що відповідає радіаційному переходу типу M_4-N_6 ; $\Gamma(M_i)$ – повна ширина M_i - рівня; $\Gamma(N_k)$ – повна ширина N_k - рівня.

Розглянемо окремий випадок $M_5N_{6,7}$ сателітів, які являють собою радіаційні переходи типу $M_5-N_{6,7}$ у присутності однієї додаткової вакансії у $N_{6,7}$ підоболонках. Обмежимося врахуванням не більше двох послідовних переходів у межах однієї оболонки та одного переходу між оболонками. Тоді можливими процесами, що призводять до виникнення початкових станів типу $M_5N_{6,7}$ являються наступні:

1) вакансія виникає в M_5 - підоболонці і відбувається $N_{6,7}$ SO- процес. Ймовірність такого процесу:

$$K_{M_5}^{N_{6,7}} = P_{M_5}^{N_{6,7}}; \quad (1)$$

2) вакансія виникає в M_4 - підоболонці і переходить до M_5 за рахунок КК- переходу типу $M_4-M_5N_{6,7}$. Ймовірність такого процесу:

$$K_{M_4}^{N_{6,7}} = f_{45N_{6,7}}; \quad (2)$$

3) вакансія виникає в M_3 - підоболонці і переходить до M_5 за рахунок таких процесів: а) КК- переходу типу $M_3-M_5N_{6,7}$; б) $N_{6,7}$ SO- процесу з наступним радіаційним M_3-M_5 переходом. Ймовірність таких процесів:

$$K_{M_3}^{N_{6,7}} = f_{35N_{6,7}} + P_{M_3}^{N_{6,7}} \omega_{M_3M_5}; \quad (3)$$

4) вакансія виникає в M_2 - підоболонці і переходить до M_5 за рахунок наступних процесів: а) КК- переходу типу $M_2-M_5N_{6,7}$; б) $N_{6,7}$ SO- процесу з наступним радіаційним M_2-M_5 переходом; в) КК- переходу типу $M_2-M_3N_{6,7}$ з наступним радіаційним M_3-M_5 переходом; г) радіаційного M_2-M_4 переходу з наступним КК- переходом типу $M_4-M_5N_{6,7}$. Ймовірність вищеписаних процесів:

$$K_{M2}^{N6,7} = f_{25N6,7} + P_{M2}^{N6,7} \omega_{M2M5} + f_{23N6,7} \omega_{M3M5} + \omega_{M2M4} f_{45N6,7}; \quad (4)$$

5) вакансія виникає в M_1 - підоболонці і переходить до M_5 за рахунок усіх можливих SO-, КК- та радіаційних процесів: а) КК- переходу типу $M_1-M_5N_{6,7}$; б) $N_{6,7}$ - SO- процесу з наступним радіаційним M_1-M_5 переходом; в) $N_{6,7}$ - SO- процесу з наступним каскадом радіаційних переходів типу M_1-M_3 і M_3-M_5 ; г) КК- переходу типу $M_1-M_2N_{6,7}$ з наступним радіаційним M_2-M_5 переходом; д) КК- переходу типу $M_1-M_3N_{6,7}$ з наступним радіаційним M_3-M_5 переходом; ж) радіаційного M_1-M_3 переходу з наступним КК- переходом типу $M_3-M_5N_{6,7}$; з) радіаційного M_1-M_4 переходу з наступним КК- переходом типу $M_4-M_5N_{6,7}$. Ймовірність вищезазначених процесів:

$$K_{M1}^{N6,7} = f_{15N6,7} + P_{M1}^{N6,7} (\omega_{M1M5} + \omega_{M1M3} \omega_{M3M5}) + f_{12N6,7} \omega_{M2M5} + f_{13N6,7} \omega_{M3M5} + \omega_{M1M3} f_{35N6,7} + \omega_{M1M4} f_{45N6,7}. \quad (5)$$

Отже, інтенсивність $M_5N_{6,7}$ - сателітів визначається за формулою:

$$I(M_5N_{6,7}) = \sum_{i=1}^5 \sigma_{Mi} K_{Mi}^{N6,7} \times \frac{\Gamma(\alpha_{1,2})}{\Gamma(M_5) + \Gamma(N_{6,7})}. \quad (6)$$

Аналогічно можна записати рівняння, за якими обчислюються інтенсивності M_5N_5 -, M_5N_4 -, M_5N_3 -, M_5N_2 - та M_5N_1 - груп $M\alpha_S$ - сателітів. Тоді повна інтенсивність $M\alpha_S$ - сателітів ($I(M\alpha_S)$) визначається як сума інтенсивностей усіх груп M_5N_k - сателітів:

$$I(M\alpha_S) = \sum_{k=1}^7 I(M_5N_k). \quad (7)$$

За аналогічними міркуваннями можна розрахувати інтенсивність $M\beta_S$ - сателітів. Для прикладу розглянемо окремі групи $M\beta_S$ - сателітів, які являють собою радіаційні переходи типу M_4-N_6 у присутності однієї додаткової вакансії у $N_{6,7}$ - підоболонках. Тоді можливими процесами, що призводять до виникнення початкових станів типу $M_4N_{6,7}$ являються наступні:

$$L_{M4}^{N6,7} = P_{M4}^{N6,7}; \quad (8)$$

$$L_{M3}^{N6,7} = f_{34N6,7}; \quad (9)$$

$$L_{M2}^{N6,7} = f_{24N6,7} + P_{M2}^{N6,7} \omega_{M2M4}; \quad (10)$$

$$L_{M1}^{N6,7} = f_{14N6,7} + P_{M1}^{N6,7} \omega_{M1M4} + f_{12N6,7} \omega_{M2M4} + \omega_{M1M3} f_{34N6,7}. \quad (11)$$

Отже, інтенсивність $M_4N_{6,7}$ сателітів визначається за формулою:

$$I(M_4N_{6,7}) = \sum_{i=1}^4 \sigma_{Mi} L_{Mi}^{N6,7} \times \frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(M_4) + \Gamma(N_{6,7})}. \quad (12)$$

Аналогічно можна записати рівняння для обчислення інтенсивностей M_4N_{5-} , M_4N_{4-} , M_4N_{3-} , M_4N_{2-} та M_4N_{1-} груп $M\beta_S$ сателітів. Тому, повна інтенсивність $M\beta_S$ сателітів ($I(M\beta_S)$) визначається як сума інтенсивностей усіх груп M_4N_k сателітів:

$$I(M\beta_S) = \sum_{k=1}^7 I(M_4N_k). \quad (13)$$

Інтенсивності повних $M\alpha$ і $M\beta$ контурів визначались за допомогою рівнянь, наведених у нашій роботі [9]. Інтенсивності $M\alpha_{1,2}$ та $M\beta$ ліній ($I(M\alpha_{1,2})$, $I(M\beta)$) визначались як різниці між інтенсивностями повних $M\alpha$ і $M\beta$ контурів та інтенсивностями відповідних $M\alpha_S$ і $M\beta_S$ сателітів. Відносні інтенсивності $M\alpha_S$ і $M\beta_S$ сателітів (S_α , S_β) визначались як відношення інтенсивностей зазначених сателітів до інтенсивностей відповідних діаграмних ліній: $S_\alpha = I(M\alpha_S)/I(M\alpha_{1,2})$, $S_\beta = I(M\beta_S)/I(M\beta)$.

Необхідно відзначити, що у представленій моделі опису інтенсивностей $M\alpha_S$ та $M\beta_S$ сателітів ми не враховуємо групи сателітів, що пов'язані з радіаційними переходами в $M_5N_iN_j$, M_5N_iX та $M_4N_iN_j$, M_4N_iX іонізованих атомах. Внесок інтенсивності таких груп сателітів у повні інтенсивності $M\alpha_S$ та $M\beta_S$ сателітів не перевищує 1%. Також до моделі не було включено процеси, пов'язані з виникненням первинної вакансії на L-підоболонках, оскільки внесок таких процесів до інтенсивностей $M\alpha_S$ та $M\beta_S$ сателітів не перевищує 1% від внеску M-підоболонки.

При обчисленні S_α і S_β використовувались наступні літературні дані: перерізи фотоіонізації M_i підоболонки [10], швидкості радіаційних переходів для M_i підоболонки [11,12], повні та парціальні ширини M_i рівнів, виходи КК-переходів та ймовірності SO-процесів [1,13-16]. Враховувались поправки, пов'язані з поглинанням первинного

характеристичного K - спектру та самопоглинання $M\alpha_{1,2}$ - і $M\beta$ - ліній у зразку.

Для проведення чисельних розрахунків відносних інтенсивностей $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів S_α , S_β та їх експериментального дослідження як зразок було використано елемент Au, як метод збудження – фотоіонізацію. Вибір фотоіонізації обумовлюється тим, що для ряду елементів з порядковими номерами $13 \leq Z \leq 90$ існують досить точні розрахунки перерізів фотопоглинання окремих L - та M - підоболонки у широкому діапазоні енергій фотонів [10], тоді як для іонізації електронним ударом такі дані фактично відсутні. Вибір Au зумовлений такими міркуваннями: для цього елементу виходи флуоресценції ω_{M4} та ω_{M5} вже досить значні, а тому при задовільній кутовій дисперсії інтенсивність $M\alpha$ - та $M\beta$ - спектрів є достатньою для надійної реєстрації; для елементів з меншим порядковим номером ($Z < 79$) виникає значне самопоглинання $M\beta$ - лінії за рахунок збудження M_5 - підоболонки, врахування якого суттєво ускладнює наведену модель опису інтенсивностей рентгенівських ліній M - серії.

Вторинні $M\alpha$ - та $M\beta$ - спектри Au було отримано при використанні довгохвильового рентгенівського спектрографу ДРС – 2 у першому порядку відбивання від площин $(10\bar{1}1)$ монокристалу кварцу. Збудження спектрів здійснювалось поліхроматичним випромінюванням рентгенівських трубок типу БХВ-12 з Cr та Cu анодами. Рентгенівські трубки з водяним охолодженням працювали у такому режимі: $U=30$ кВ, $I=60$ мА. Оцінка частини фотонів вторинного M - спектру, яка при таких умовах генерується гальмівним спектром [17], по відношенню до частини, яка збуджується $K\alpha$ - та $K\beta$ - лініями Cr та Cu, не перевищує 3%. Отже, можна вважати, що збудження M - спектрів Au практично здійснюється характеристичними K - спектрами Cr та Cu. Методика обробки спектрограм та виділення короткохвильових $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів з загальних контурів була стандартною [18]. Відносна похибка визначення величин S_α і S_β не перевищувала 10%.

Розраховані за розробленою моделлю опису інтенсивностей ліній рентгенівської M - емісії значення відносних інтенсивностей $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів Au ($S_{\alpha\text{розра.}}$, $S_{\beta\text{розра.}}$) та експериментально визначені відносні інтенсивності зазначених сателітів ($S_{\alpha\text{експ.}}$, $S_{\beta\text{експ.}}$) при збудженні характеристичними K - спектрами Cr і Cu представлено у таблиці. Також у табл. наведено розраховані значення відносних інтенсивностей окремих груп M_5N_k - сателітів ($S(N_k)$) та M_4N_k - сателітів ($S'(N_k)$).

Таблиця

Розраховані та експериментально визначенні відносні інтенсивності $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів Au при збудженні K- спектрами Cr і Cu

$M\alpha_5$ - сателіти								
	$S(N_1)$	$S(N_2)$	$S(N_3)$	$S(N_4)$	$S(N_5)$	$S(N_{6,7})$	$S_{\text{арозр.}}$	$S_{\text{експ.}}$
Cr	0.002	0.005	0.013	0.019	0.031	0.471	0.541	0.522 ± 0.048
Cu	0.002	0.005	0.015	0.021	0.035	0.523	0.601	0.571 ± 0.055
$M\beta_5$ - сателіти								
	$S'(N_1)$	$S'(N_2)$	$S'(N_3)$	$S'(N_4)$	$S'(N_5)$	$S'(N_{6,7})$	$S_{\text{врозр.}}$	$S_{\text{експ.}}$
Cr	0.002	0.003	0.009	0.014	0.022	0.342	0.392	0.413 ± 0.036
Cu	0.002	0.003	0.011	0.016	0.027	0.395	0.454	0.470 ± 0.044

Як видно, розраховані та експериментально отримані значення відносних інтенсивностей $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів Au при збудженні характеристичними K- спектрами як Cr, так і Cu узгоджуються у межах похибки експерименту, що свідчить про коректність запропонованої моделі опису інтенсивностей ліній рентгенівської M- емісії. Необхідно відзначити, що головний внесок у загальну інтенсивність $M\alpha_5$ - сателітів надає група сателітів, що пов'язана з радіаційними переходами в $M_5N_{6,7}$ - іонізованих атомах, а головний внесок у загальну інтенсивність $M\beta_5$ - сателітів надає, відповідно, група сателітів, що пов'язана з радіаційними переходами в $M_4N_{6,7}$ - іонізованих атомах. Такі групи сателітів складають більш ніж 85% від загальної інтенсивності усіх груп $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів.

Таким чином, у даній роботі запропоновано модель опису інтенсивностей ліній рентгенівської M- емісії, що дозволяє визначити відносні інтенсивності $M\alpha_5$ - та $M\beta_5$ - сателітів важких елементів $Z > 70$. Для елемента Au проведено експериментальне дослідження величин S_α , S_β при збудженні $M\alpha$ - та $M\beta$ - спектрів поліхроматичним випромінюванням рентгенівських трубок БХВ-12 з Cr та Cu анодами. Виявлено, що експериментально отримані та розраховані значення величин S_α , S_β у межах похибки практично співпадають, що свідчить про коректність запропонованої моделі. Представлена у роботі модель також може бути використана для визначення внесків різних кратноіонізованих станів у повні інтенсивності зазначених сателітів. В подальшому запропонована модель рентгенівської M-емісії може бути використана для визначення

характерних атомних параметрів елементів $Z > 70$, зокрема перерізів іонізації M-підоболонки та ймовірностей автоіонізаційних процесів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Campbell J.L., Papp T. Width of the atomic K-N7 levels // *Atom. Data Nucl. Data Tables.* – 2001. – V. 77, № 1. – P. 1–56.
2. Sogut O., Buyukasap E., Kucukonder A. et al. Fit values of M-subshell fluorescence yields and Coster-Kronig transitions for elements with $20 \leq Z \leq 90$ // *X-ray spectrom.* – 2002. – V. 31, № 1. – P. 62–70.
3. Pajek M., Banas D., Braziewicz J. et al. M-shell ionization of heavy elements by 0.1–1.0 MeV/amu ^1H and ^3He ions // *Phys. Rev. A.* – 2006. – V. 73, 012709 (16).
4. Erturgul M., Sade K., Erdogan H. Calculation of M X-ray production cross sections from 1–1500 keV in the atomic region $70 \leq Z \leq 92$ // *X-ray spectrom.* – 2004. – V. 33, № 2. – P. 136–145.
5. Pajek M., Jaskola M., Czyzewski T. et. al. M-shell X-ray production cross sections for PIXE applications // *Nucl. Instrum. Meth. B.* – 1999. – V. 150, № 1–4. – P. 33–39.
6. Amirabadi A., Afarideh A., Haji-Saeid S. et. al. L-subshell and total M-shell X-ray production cross-sections of Hg for protons of energy 0.7–2.9 MeV // *J. Phys. B.* – 1997. – V. 30, № 4. – P. 863–872.
7. Sing Y., Tribedi L.C. M-subshell x-ray production cross section of Au induced by highly charged F, C and Li ions and protons: A large enhancement in the M_3 fluorescence yield // *Phys. Rev. A.* – 2002. – V. 66, 062709 (7).
8. Боровой Н.А., Ищенко Р.Н., Шияновский В.И. Парциальная ширина L_1 -уровня, связанная с переходом Костера–Кронига $L_1-L_3M_5$ в атомах элементов W, Re, Os, Ir, Pt // *Опт. и спектр.* – 2003. – Т. 95, № 4. – С. 566–570.
9. Боровий М.О., Іванов В.В., Суржко В.Ф., Шияновський В.І. Відносна інтенсивність ліній рентгенівського емісійного M-спектра // *УФЖ* – 1994. – Т. 39, № 9,10. – С. 1006–1009.
10. Pratt R.H., Ron A., Tseng H.K. Atomic photoelectric effect above 10 keV // *Rev. of Mod. Phys.* – 1973. – V. 45, № 2. – P. 273–325.
11. Scofield J.H. Relativistic Hartree-Slater values for K and L X-ray emission rates // *Atom. Data Nucl. Data Tables.* – 1974. – V. 14, № 1. – P. 121–137.
12. Chen M.H., Crasemann B. M X-ray emission rates in Dirac-Fock approximation // *Phys. Rev. A.* – 1984. – V. 30, № 1. – P. 170–176.
13. Mc Guire E.J. Atomic M-shell Coster-Kronig, Auger, and radiative rates, and fluorescence yields for Ca–Th // *Phys. Rev. A.* – 1972. – V. 5, № 3. – P. 1043–1047.

14. Mc Guire E.J. M-shell Auger and Coster-Kronig electron spectra // Phys. Rev. A. – 1972. – V. 5, № 3. – P. 1052–1059.
15. Chen M.H., Crasemann B., Mark H. Relativistic radiationless transition probabilities for K- and L- shells // Atom. Data Nucl. Data Tables. – 1979. – V. 24, № 1. – P. 13–37.
16. Chen M.H., Crasemann B., Mark H. Radiationless transitions to atomic M_{1,2,3} shells: results of relativistic theory // Phys. Rev. A. – 1983. – V. 27, № 6. – P. 2989–2994.
17. Pratt R.H., Tseng H.K., Lee C.M. Bremsstrahlung energy spectra from electrons of kinetic energy $1\text{keV} \leq T_1 \leq 2000\text{keV}$ incident on neutral atoms $2 \leq Z \leq 92$ // Atom. Data Nucl. Data Tables. – 1977. – V. 20, № 4. – P. 175–209.
18. Боровой Н.А., Кмецинская Н.А., Суржко В.Ф., Шияновский В.И. Рентгеновские эмиссионные $L\alpha_1$ - и $L\beta_2$ - спектры высокого разрешения атомов элементов Hf, Ta, W, Re и Os // Опт. и спектр. – 2002. – Т. 93, № 3. – С.377–382.

Надійшла до редколегії 28.02.2006

УДК 535.32/34

Вінніченко М.В., докторант.,
Поперенко Л.В., проф.,
Озеров* М.В., асп.,
Лебедева Т.С., ст.наук.спів.,
Шпильовий П.Б., асп.

**Оптичні властивості плівок
оксиду цинку, виготовлених
методом реактивного
магнетронного розпилення при
різних тисках залишкових газів.**

Методом реактивного магнетронного розпилення виготовлено прозорі плівки ZnO при різному початковому рівні вакууму. Властивості плівки досліджувалися за допомогою методів атомно-силової мікроскопії та еліпсометрії. З'ясовано, що залишкові гази впливають в основному на процес формування плівки, що проявляється у зменшенні рухливості плівкоутворювальних частинок і на виникненні пустот в плівці.

Ключові слова: магнетронне розпилення, залишкові гази, плівки ZnO, спектральна еліпсометрія, АСМ.

Vinnichenko M.V., Ph.D.,
Poperenko L.V., proff.,
Ozerov* M.V., Ph.D. student,
Lebedeva T.S., Ph.D.,
Shpylevoy P.B., Ph.D. student.

**Optical properties ZnO films
formed by reactive magnetron
sputtering at different initial
pressure of residual gases**

The investigation of zinc oxide caused by great potential of its applications in many industry directions. ZnO films are manufactured by reactive magnetron sputtering method with different initial base pressure. The surface and optical properties performed due to AFM and ellipsometry. It is ascertain, that presence of residual gases leads to a decrease of the mobility of the formed particles and rise of internal avoids.

Key words: magnetron sputtering, residual gases, ZnO film, spectrellipsometry, AFM.

*E-mail: ozer@ukr.net

Вступ

Дослідження оксиду цинку ZnO зумовлене його застосуванням як перспективного матеріалу в таких галузях як лазерна техніка [1,2], нанотехнологія [3], техніка (ТСО покриття) [4], детектування (газові сенсори). Оксид цинку - це широкозонний напівпровідник p-типу з шириною забороненої зони 3.4 eV, що належить до просторової групи симетрії R_{63}/mc (структура вюрциту) [5]. Плівки ZnO привабливі тим, що це якісні полікристалічні плівки з середньою рухливістю носіїв заряду ($>10 \text{ cm}^2/\text{V s}$ за ефектом Холла) при кімнатній температурі. Крім того вони сумісні з пластичними або гнучкими матеріалами підкладок, на які наносяться. Особливо великий інтерес викликає p-тип оксиду цинку для створення напівпровідникового лазера в ультрафіолетовому діапазоні [6,7].

Оптичні властивості плівок ZnO залежать від параметрів методу осадження плівки і можуть відрізнятися між собою в залежності від того як були виготовлені. В даній роботі плівки виготовлені методом реактивного магнетронного розпилення, що має ряд переваг у порівнянні з іншими.

На сьогоднішній день метод планарного магнетронного розпилення, як добре налагоджена техніка осадження плівок металу і оптичних покриттів [4], широко використовується для нанесення просвітлюючих покриттів на скло, інтегрованих кіл, плоских панельних дисплеїв або тяжких покриттів, таких як нітрид титану. Використовуючи технологію реактивного магнетронного розпилення і контролюючи кінетику росту, параметри процесу і хімічний склад вихідного матеріалу можна синтезувати широкий клас наноструктур на основі ZnO.

Фізичні властивості плівок, що виготовлені даним методом, сильно залежать від сукупності параметрів процесу осадження плівки (початковий та парціальні тиски газів, співвідношення потужність/інтенсивність осадження, температура підкладки, енергія бомбардуючих часток). Зокрема збільшення тиску кисню покращує оптичні характеристики плівки (її прозорість), але погіршує електричні – провідність [8].

Оскільки одним із параметрів осадження є початковий рівень вакууму в камері, то мета роботи полягала виявити вплив залишкових газів на формування і оптичні властивості плівки ZnO. Для цього осадження плівок проходило при варіюванні початкового тиску залишкових газів у вакуумній камері.

Експериментальна частина

Плівки ZnO нанесено методом магнетронного реактивного розпилення у вакуумній камері. В якості підкладки слугувала пластинка кремнію (111) у формі прямокутників зі сторонами $1 \times 1,5$ см², з попередньою хімічною та плазмохімічною очисткою поверхні. Співвідношення реактивного газу $\text{PO}_2(\text{PO}_2 + \text{PAr})$ обиралося 48 % для отримання прозорих плівок. В камері послідовно осаджували три серії зразків плівок з початковим тиском у камері 5×10^{-4} mBar, 5×10^{-5} mBar і $8,8 \times 10^{-7}$ mBar і потужностями розряду 62 Вт, 74Вт, 99Вт відповідно. Вакуум $8,8 \times 10^{-7}$ mBar досягався з використанням азотних пасток, аби виморозити пари води і виключити їх можливий вплив. Парціальні тиски газів O_2 і Ar фіксувалися на рівні 6×10^{-3} і 7×10^{-3} mBar відповідно. Відхилення цих значень тисків не перевищувало 5%. Сумарне значення тиску в процесі розпилення стабілізувалося заслінкою насоса. Час осадження складав 420 с.

Властивості одержаних плівок досліджувалися атомносиловою мікроскопією (АСМ), що дозволяє одержати інформацію про структуру поверхні плівки; та еліпсометрією, яка дає інформацію як про шорсткість поверхні, так і про оптичні властивості плівки.

Отримані зразки слугували об'єктом AFM-мікроскопії, яка виконувалась на атомосиловому мікроскопі NANOSCOP-3-а. Знімки одержані для зразків з усіх трьох позицій та для самої підкладки (Рис.1). Досліджувана область мала форму прямокутника розміру $1 \times 1 \text{ мкм}^2$.

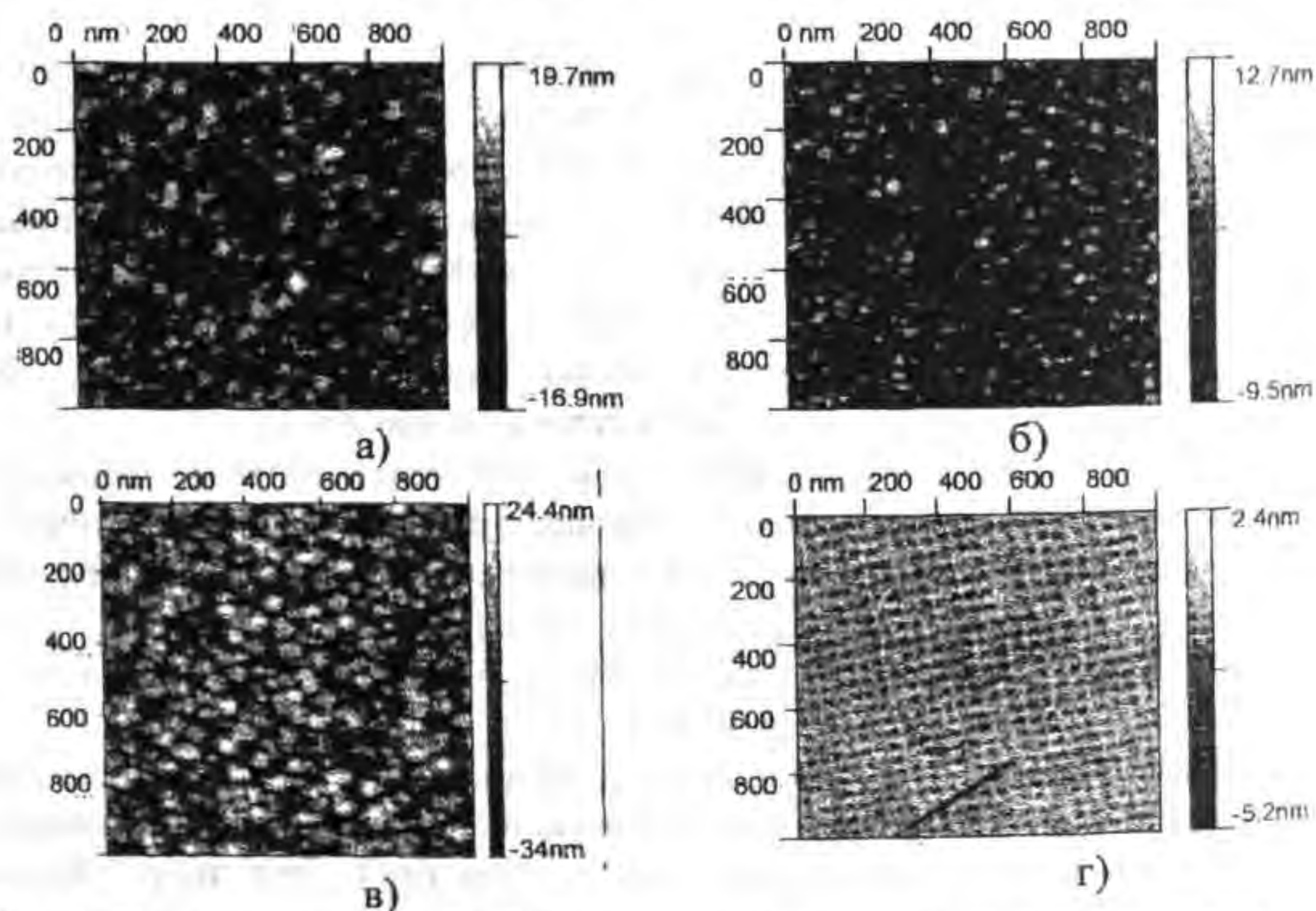


Рис.1. Поверхня плівок ZnO, виготовлених при початкових тисках а) $5 \times 10^{-4} \text{ mBar}$, б) $5 \times 10^{-5} \text{ mBar}$ в) $8,8 \times 10^{-7} \text{ mBar}$, г) кремнієвої підкладки.

При використанні сучасних технічних засобів еліпсометрія дозволяє розробляти цілий ряд безконтактних неруйнівних чутливих методів дослідження стану поверхні та структури тонких поверхневих шарів. Основним практичним напрямом розвитку еліпсометрії є дослідження складу та структури речовини. Зміна стану поляризації визначається не тільки оптичними характеристиками середовища, від якого відбивається світло, та кутом падіння на межі розділу, а і характеристиками мікрорельєфу самої поверхні.

Еліпсометричні вимірювання виконувались на еліпсометрі M-2000 (J.A. Woollam, Inc, USA) із програмним забезпеченням WVASE. Одержані спектральні залежності Δ та Ψ оптимізувались трьох шаровою моделлю: шорсткість/оксид цинку/власний оксид/підкладка. Оптичні властивості оксиду цинку описувались параметризацією Таук-Лоренца (рис. 2). Згідно цієї оптимізації товщини плівок складають 180 нм, 129 нм, 491 нм (відповідні швидкості росту плівок – 0.47 нм/с, 0.32 нм/с, 1.24 нм/с) для зразків з початковим вакуумом $5 \times 10^{-4} \text{ mBar}$, $5 \times 10^{-5} \text{ mBar}$ і $8,8 \times 10^{-7} \text{ mBar}$.

відповідно. Останнє значення практично співпадає із товщиною, що оцінена за допомогою АСМ – 496 нм.



Рис.2. Спектральні залежності показника заломлення плівок ZnO згідно Таук-Лоренц параметризації.

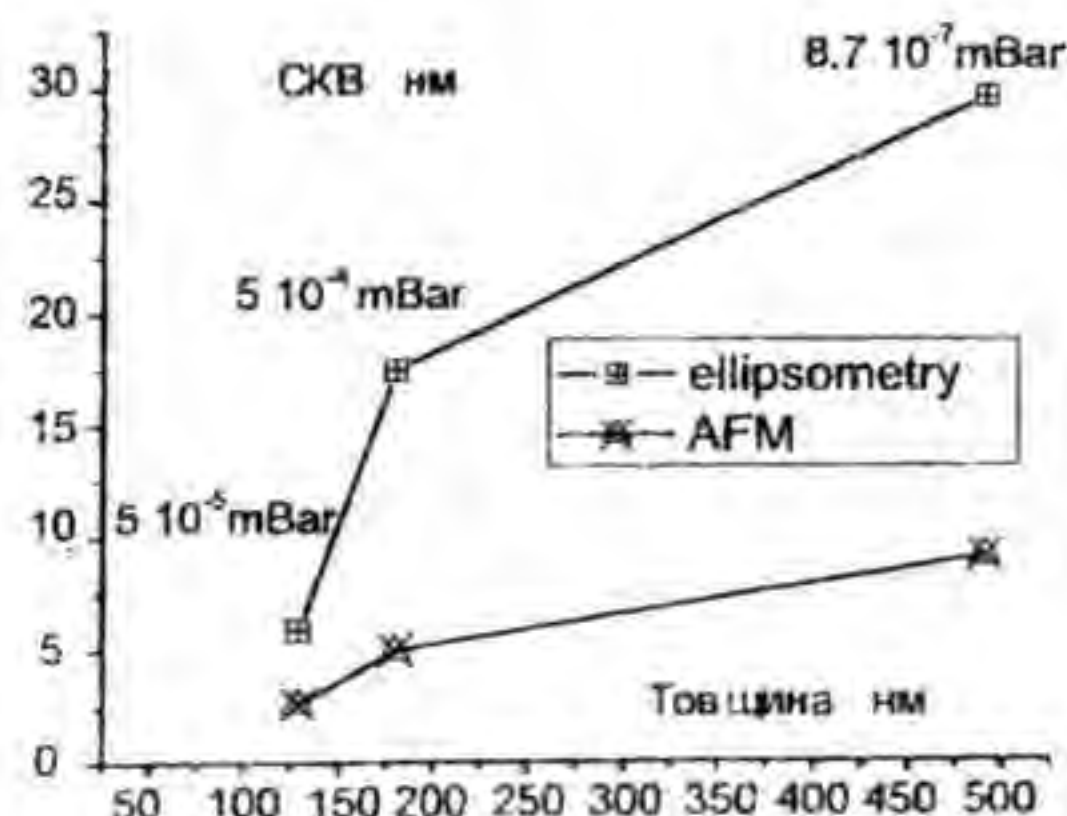


Рис.3. Значення середньоквадратичного відхилення шорсткості (СКВ), одержані еліпсометрією та АСМ

Обидва методи дозволяли одержати таку характеристику поверхні, як її шорсткість (Рис. 3). Різниця між цими значеннями пояснюється не тільки різними масштабами досліджуваних ділянок поверхні, але й принциповими відмінностями, оскільки відбите світло дозволяє одержувати інформацію про структуру поверхневих шарів. Значення СКВ одержанні двома методами корелюють між собою.

Обговорення

Основним недоліком експерименту являється те, що осадження трьох плівок відбувалось при різних потужностях магнетрона, оскільки напруга і струм магнетрона зростали із зменшенням тиску в камері. Це пов'язано як із окисленням мішені, яке інтенсивніше відбувається за відсутності залишкових газів, так і зі зростанням порогу запалення розряду (оскільки при менших тисках складніше іонізувати робочу область магнетрона). Не дивлячись на те, що потужність розряду при початковому рівні вакууму $5 \cdot 10^{-5}$ mBar була більше, ніж при $5 \cdot 10^{-4}$ mBar, одержали тоншу плівку із-за нестабільності розряду. Хоча потужність магнетрона обиралася мінімально можливою, розряд ще залишався стабільним.

Згідно АСМ даних видно, що методом реактивного магнетронного розпилення одержали зернисту плівку ZnO, що свідчить про її полікристалічну структуру. Із покращенням початкового рівня вакууму плівка починає мати впорядковану колоноподібну структуру із характерним поперечним розміром однієї колони порядку 50 нм. В процесі росту для початкового рівня вакууму $8,8 \cdot 10^{-7}$ мБар вміст залишкових газів, а особливо пари води, як мінімум на порядок, менший у порівнянні з

попередніми випадками. Вміст H_2O та груп OH , що виникають після часткової дисоціації води в плазмі, зменшує рухливість атомів Zn і молекул-димерів ZnO на підкладці за рахунок утворення інерційних сполук. Таким чином, із зменшенням тиску залишкових газів зростає шорсткість поверхні плівки ZnO .

Для ІТО (індій-олово оксиду) плівок, одержаних методом магнетронного розпилення, типовою є створювана колоноподібна структура з чіткими границями між зернами [9]. Те саме спостерігається і для плівок ZnO , оскільки завищені значення середньоквадратичного відхилення (СКВ), що отримують з еліпсометричного експерименту, можна пояснити наявністю пустот між кристалітами. Тому цілком закономірно припустити, що під час росту плівки газу можуть адсорбуватись, тим самим змінювати її фізичні властивості, і зокрема, концентрацію носіїв заряду в шарі.

Дисперсія показника заломлення плівки ZnO зростає при наближенні енергії фотона до 3.4 еВ, оскільки для даних енергій фотону починається поглинання світла за рахунок міжзонних переходів. Варіація товщини плівок не вплинула на поведінку показника заломлення, а саме: із зменшенням початкового тиску в камері збільшується показник заломлення плівки. Це пояснюється тим, що плівкоутворювальні частки сприяють формуванню плівки із великими кристалітами, і як наслідок, з більшою поруваністю структури. Дія залишкових газів проявляється у зменшенні рухливості плівкоутворювальних часток на поверхні плівки під час її росту за рахунок утворення хімічних сполук. Таким чином, для одержання структурованої полікристалічної плівки оксиду цинку ZnO розпилення слід проводити при максимально можливому рівні початкового вакууму.

Висновки

В результаті аналізу отриманих результатів можна зробити такі висновки :

- відмінності одержаних спектрів показника заломлення плівок оксиду цинку пояснюються варіацією потужності магнетронного розпилення і початкового рівня вакууму;
- із зменшенням початкового тиску у вакуумній камері від $5 \cdot 10^{-4}$ до $8,8 \cdot 10^{-7}$ мБар зростає шорсткість плівки оксиду цинку ZnO від 4,9 нм до 9,4 нм відповідно, а формування самої плівки супроводжується наявною стовпчастою мікроструктурою в зразках, отриманих методом реактивного магнетронного розпилення;
- присутність залишкових газів в вакуумній камері впливає на сам процес формування плівок шляхом зменшення рухливості плівкоутворювальних частинок і на виникнення пустот в плівці.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Reynolds D.C., Look D.C., Jogai B. Optically pumped ultraviolet lasing from ZnO // *Solid State Communications*, V. 99. N. 12. P. 873-875, 1996,
2. Zamfirescu M., Kavokin A., Gil B., Malpuech G., Kaliteevski M. ZnO as a material mostly adapted for the realization of room-temperature polariton lasers // *Physical Review B*, 2002, V. 65.
3. Zhong Lin Wang. Nanostructures of zinc oxide // *Review feature*, 2004 June.
4. Klaus Ellmer. Magnetron sputtering of transparent conductive zinc oxide: relation between the sputtering parameters and the electronic properties// *Journal of Applied Physics*. 33. 2000, R17-R32.
5. Tomzig E. and Helbig R. Band-edge emission in ZnO // *Journal of Luminescence*, V.14, 1976, P.403-415.
6. Fimiyasu Oba, Shigeto R. Nishitani, Seiji Isotani and Hirohiko Adachi. Energetics of native defects in ZnO // *Journal of Applied Physics*. V. 90. July, 2001, P. 824-828.
7. David C Look. Electrical and optical properties of p-type ZnO // *Semicond. Sci. Technol.* 20. 2005 , S55-S61.
8. Vinnichenko M., Poperenko L., Lebedeva T., Shpylevoy P. and other. Control of properties and structure of ZnO thin films by a wide variation of oxygen pressure during reactive magnetron deposition and by post-deposition annealing // *Abs. of European Materials Research Society Spring Meeting*, May 31-June 3 2005, Strasbourg, France .
9. Rogozin A., Vinnichenko M., Shevchenko N., Kolitsch A., Moller W. Plasma influence on the properties and structure of indium tin oxide films produced by reactive middle frequency pulsed magnetron sputtering // *Thin Solid Films*, 2005.

УДК 535:537:539:546

Юлія С. Гончарук, аспірант,
Леонід Г. Гречко, докт. ф.-м. наук,
Олена Ю. Гришук, студентка,
Леонід Б. Лерман, канд. техн. наук,
Сергій В. Шостак, канд. ф.-м. наук

Максвелл-Вагнерівська поляризація матричних дисперсних систем з кульовими напівпровідниковими включеннями в електричному полі

Розраховано поляризованість діелектричної кулі з напівпровідниковою оболонкою в електричному полі, яке гармонічно змінюється у часі. Знайдено частотні залежності ефективної діелектричної функції матрично-дисперсних систем з такими включеннями в однорідному полі. Наводяться приклади чисельних розрахунків.

Ключові слова: поляризованість, кульові напівпровідникові частинки, матрично-дисперсні системи

Yuliya S. Goncharuk, post-graduate,
Leonid G. Grechko, Dr. Sc.,
Olena Yu. Grischuk, student,
Leonid B. Lerman, Ph. D.
Sergiy V. Shostak, Ph. D.

Maxwell-Vagner polarization of matrix-disperse systems with spherical semi-conductor particles in electric field

A polarization of a dielectric sphere with a semi-conducted shell in a time-harmonic electric field is determined. The case of a homogeneous field is separately considered. A frequency disperses of an effective dielectric function of the matrix-disperse systems with these inclusions is founded for this case. Examples of numerical calculation are presented.

Key words: polarization, equations, spherical semi-conductor particles, matrix-disperse systems

E-mail: llerman @ yandex.ru

1. **Вступ.** Механізм Максвелл-Вагнерівської поляризації широко використовується на практиці для визначення діелектричних властивостей різних середовищ - від звичайних діелектриків і провідників - до живих клітин [1-4]. В цій роботі розв'язується задача визначення ефективних діелектричних характеристик матричних дисперсних систем (МДС) з кульовими включеннями з напівпровідниковою оболонкою. В прийнятій моделі визначення ефективної діелектричної проникності МДС зводиться до визначення поляризованості, що в свою чергу пов'язано з розв'язанням задачі теорії потенціалу. Визначається поляризованість кульової частинки з напівпровідниковою оболонкою. Зовнішнє гармонічне електричне поле в загальному випадку вважається просторово неоднорідним. Особливо розглядається випадок однорідного поля, і з отриманих загальних співвідношень впливає розв'язок задачі для суцільної напівпровідникової кулі, наведений в [4]. Частково цей матеріал було представлено на конференції [5].

2. Куля з напівпровідниковою оболонкою в електричному полі. Рівняння, представлення розв'язків і граничні умови. Розглянемо окрему частинку у вигляді кулі з оболонкою і, як частинний випадок, суцільну кулю. Зв'яжемо з центром кулі декартову (x, y, z) і сферичну системи координат r, φ, θ . Вважається, що частинка знаходиться в ізоляторі під дією зовнішнього електричного поля з потенціалом $\phi_e = \phi_e(r, \theta, \varphi)$, напруженість якого гармонічно змінюється у часі $\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r})e^{i\omega t}$, де ω - частота, t - час. Відносні діелектричні проникності ядра, оболонки та навколишнього середовища позначимо через $\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_m$ відповідно, а радіуси внутрішньої і зовнішньої кулі через r_1, r_2 . (Рис.1).

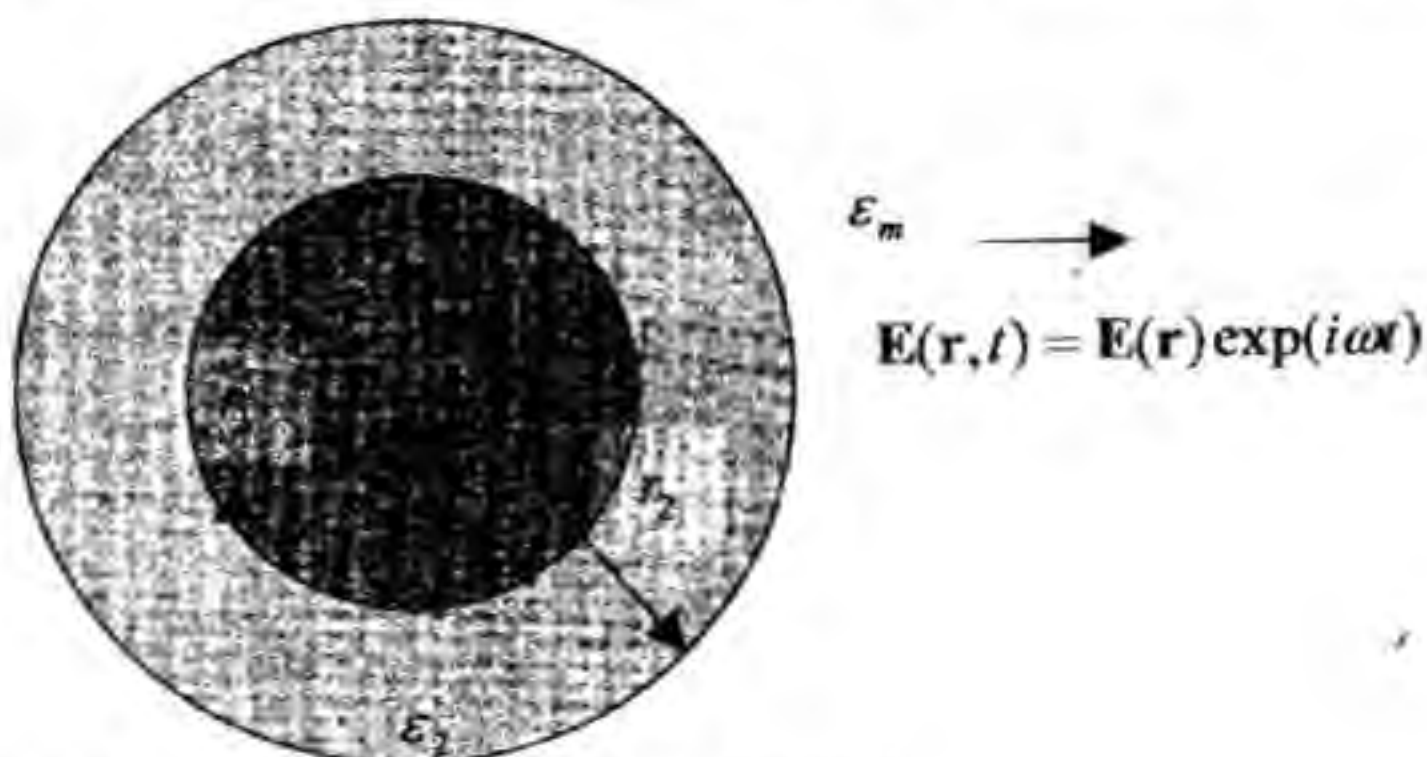


Рис.1. Розрахункова схема задачі.

Вважаємо, що внутрішня куля (ядро частинки) – це звичайний діелектрик, а матеріал оболонки представляє собою напівпровідник. Концентрації носіїв обох знаків у напівпровіднику позначимо через n_+ і n_- , а їх рухливості – через u_+ і u_- . У відсутності електричного поля вважається, що $n_+ = n_- = n$. Нехай $\phi_1 = \phi_1(r, \theta)$, $\phi_2 = \phi_2(r, \theta)$, $\phi_3 = \phi_3(r, \theta)$ потенціали електричних полів у ядрі, оболонці та навколишньому середовищі відповідно. Потенціали в ядрі і зовні кулі будуть розв'язками рівнянь Лапласа

$$\Delta \phi_1 = 0, \quad (1) \quad \Delta \phi_3 = 0, \quad (2)$$

де Δ - тривимірний оператор Лапласа в сферичній системі координат. Розв'язок внутрішньої задачі для рівняння Лапласа (1), обмежений в нулі, і розв'язок зовнішньої задачі для рівняння (2), який згасає на нескінченності мають відповідно вигляд

$$\phi_1(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l B_{lm}^{(1)} r^l Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (3) \quad \phi_3(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{A_{lm}^{(3)}}{r^{l+1}} Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

де $B_{lm}^{(1)}$, $A_{lm}^{(3)}$ - невідомі коефіцієнти розкладів, $Y_l^{(m)}(\theta, \varphi)$ - сферичні функції [6], які вважаються нормованими.

Надалі будемо позначати потенціал в напівпровідниковому шарі $U = \phi_2$. Під дією електричного поля носії зарядів будуть перерозподілятися відповідно з рівняннями нерозривності [4]

$$\frac{\partial n_+}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}_+ = \text{div}(n_+ u_+ \text{grad} U + D_+ \text{grad} n_+), \quad \frac{\partial n_-}{\partial t} = -\text{div} \vec{j}_- = \text{div}(n_- u_- \text{grad} U + D_- \text{grad} n_-), \quad (5)$$

де $\vec{j}_+, \vec{j}_-$ - потоки, D_+, D_- - коефіцієнти дифузії носіїв.

Для простоти вважаємо, що коефіцієнти дифузії однакові $D_+ = D_- = D$. Тоді в силу рівняння Ейнштейна буде

$$eD = ukT, \quad (6)$$

де e - заряд носіїв, k - стала Больцмана, T - абсолютна температура.

Для низьких рівнів напруженості, як і в [4], можна записати

$$n_+(\vec{r}, t) = n + \mu_+(\vec{r}) \exp(i\omega t), \quad n_-(\vec{r}, t) = n + \mu_-(\vec{r}) \exp(i\omega t), \quad (7)$$

де $\mu_+(\vec{r}), \mu_-(\vec{r})$ - концентрації носіїв, які приймають участь в переносі зарядів.

При цьому вважається, що справджуються сильні нерівності

$$|\mu_+| \ll n, \quad |\mu_-| \ll n. \quad (8)$$

З врахуванням виразу (6) і представлень концентрацій носіїв (7) рівняння нерозривності в гармонічному полі приймають вигляд

$$\frac{i\omega}{D} \mu_+ = \frac{e}{kT} \operatorname{div}(n + \mu_+) \operatorname{grad} U + \operatorname{div} \operatorname{grad}(n + \mu_+), \quad (9) \quad \frac{i\omega}{D} \mu_- = \frac{e}{kT} \operatorname{div}(n + \mu_-) \operatorname{grad} U + \operatorname{div} \operatorname{grad}(n + \mu_-). \quad (10)$$

Рівняння (9)-(10) - нелінійні, але за умови виконання нерівностей (8) вони допускають лінеаризацію, і, в результаті, будемо мати

$$\frac{i\omega}{D} \mu_+ = \frac{ne}{kT} \Delta U + \Delta \mu_+, \quad \frac{i\omega}{D} \mu_- = \frac{ne}{kT} \Delta U + \Delta \mu_-. \quad (11)$$

При наявності зарядів, потенціал всередині кульового шару повинен задовольняти рівнянню Пуассона

$$\Delta U = -\frac{4\pi e}{\epsilon_0 \epsilon_2} \mu, \quad \mu = \mu_+ - \mu_-, \quad (12)$$

де ϵ_0 - діелектрична стала.

Отримана система рівнянь (11), (12) - замкнена відносно функцій U і μ . Підставимо вираз для ΔU з рівняння (12) до рівнянь (11)

$$\Delta \mu_+ = \left(\frac{i\omega}{D} + \frac{4\pi ne^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 kT} \right) \mu_+ - \frac{4\pi ne^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 kT} \mu_-, \quad \Delta \mu_- = \left(\frac{i\omega}{D} + \frac{4\pi ne^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 kT} \right) \mu_- - \frac{4\pi ne^2}{\epsilon_0 \epsilon_2 kT} \mu,$$

і віднімемо від першого рівняння друге. Тоді для невідомої функції $\mu = \mu_+ - \mu_-$ отримаємо рівняння:

$$\Delta \mu = \gamma^2 \mu, \quad (13)$$

де $\gamma^2 = \kappa^2 + i\omega/D$, $\kappa^2 = 8\pi ne^2 / (\epsilon_0 \epsilon_2 kT)$.

Рівняння (13) є не що інше, як рівняння Дебая-Х'юккеля, яке розглядалося нами раніш [7]. Його розв'язок можна подати у вигляді

$$\mu(\rho, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (C_{lm}^{(1)} i_l(\gamma r) + C_{lm}^{(2)} k_l(\gamma r)) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (14)$$

де $C_{lm}^{(1)}, C_{lm}^{(2)}$ - довільні сталі, $i_l(\gamma r), k_l(\gamma r)$ - модифіковані сферичні функції Бесселя комплексного аргументу першого і третього роду відповідно [6].

Розв'язок рівняння (12) є сума загального розв'язку однорідного рівняння U_{gen} і частинного розв'язку неоднорідного рівняння U_{par} . Загальний розв'язок запишеться у вигляді

$$U_{gen} = \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{A_{lm}^{(2)}}{r^{l+1}} + B_{lm}^{(2)} r^l \right) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi). \quad (15)$$

Оскільки результатом дії оператора Лапласа на функцію μ є функція $\gamma^2 \mu$, то частинний розв'язок рівняння (12) можна подати у вигляді

$$U_{par}(r, \theta) = -\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} \mu(r, \theta).$$

Із врахуванням (15) и виразу для μ (14) отримаємо наступний розклад для потенціалу в оболонці кулі

$$\phi_2 = U(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{A_{lm}^{(2)}}{r^{l+1}} + B_{lm}^{(2)} r^l \right) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi) - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (C_{lm}^{(1)} i_l(\gamma r) + C_{lm}^{(2)} k_l(\gamma r)) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi). \quad (16)$$

Розв'язки диференціальних рівнянь побудовані, и задача зводиться до визначення сталих $B_{lm}^{(1)}, A_{lm}^{(2)}, B_{lm}^{(2)}, A_{lm}^{(3)}, C_{lm}^{(1)}, C_{lm}^{(2)}$. Для їх знаходження маємо чотири співвідношення, які відображають неперервність потенціалів и нормальних компонент векторів електричної індукції

$$\phi_1(r_1) = \phi_2(r_1), \quad \phi_2(r_2) = \phi_3(r_2) + \phi_e(r_2) \quad (17)$$

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \phi_1}{\partial r} \Big|_{r=r_1} = \varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial r} \Big|_{r=r_1}, \quad \varepsilon_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial r} \Big|_{r=r_2} = \varepsilon_m \frac{\partial \phi_3}{\partial r} \Big|_{r=r_2} + \varepsilon_m \frac{\partial \phi_e}{\partial r} \Big|_{r=r_2}. \quad (18)$$

Ще два рівняння дають умови обертання на нуль нормальних компонент потоків носіїв на межах кульового шару [2]

$$\left(\frac{\partial \phi_2}{\partial r} + \frac{kT}{2en} \frac{\partial \mu}{\partial r} \right)_{r=r_1} = 0, \quad \left(\frac{\partial \phi_2}{\partial r} + \frac{kT}{2en} \frac{\partial \mu}{\partial r} \right)_{r=r_2} = 0. \quad (19)$$

3. Система для визначення коефіцієнтів розкладів потенціалів. Спочатку виписемо вирази частинних похідних від потенціалів:

$$\frac{\partial}{\partial r} \phi_1(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l l B_{lm}^{(1)} r^{l-1} Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \phi_3(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-(l+1) \frac{A_{lm}^{(3)}}{r^{l+2}} \right) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (21)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \phi_2(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-(l+1) \frac{A_{lm}^{(2)}}{r^{l+2}} + l B_{lm}^{(2)} r^{l-1} \right) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi) - \frac{4\pi e}{\varepsilon_2 \gamma^2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (C_{lm}^{(1)} i'_l(\gamma r) + C_{lm}^{(2)} k'_l(\gamma r)) \gamma Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} \mu(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \gamma (C_{lm}^{(1)} i'_l(\gamma r) + C_{lm}^{(2)} k'_l(\gamma r)) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi). \quad (23)$$

В формулах (22), (23) штрих означає операцію взяття похідної функції за своїм аргументом. Додатково розвинемо зовнішній потенціал в ряд за сферичними функціями, тобто представимо його у вигляді

$$\phi_e(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_l^{(m)}(\theta, \varphi). \quad (24)$$

Граничні умови повинні виконуватись за будь-яких θ, φ , отже, підставляючи вирази для похідних, для кожних значень l, m отримаємо наступну сукупність незалежних систем лінійних алгебраїчних рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів

$$B_{lm}^{(1)} r_1^l = \frac{A_{lm}^{(2)}}{r_1^{l+1}} + B_{lm}^{(2)} r_1^l - \frac{4\pi e}{\varepsilon_2 \gamma^2} (C_{lm}^{(1)} i_l(\gamma r_1) + C_{lm}^{(2)} k_l(\gamma r_1)), \quad (25)$$

$$\frac{A_{lm}^{(2)}}{r_2^{l+1}} + B_{lm}^{(2)} r_2^l - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} (C_{lm}^{(1)} i_l(\gamma r_2) + C_{lm}^{(2)} k_l(\gamma r_2)) = \frac{A_{lm}^{(3)}}{r_2^{l+1}} + f_{lm}(r_2), \quad (26)$$

$$\varepsilon_1 l B_{lm}^{(1)} r_1^l = \varepsilon_2 \left[-(l+1) \frac{A_{lm}^{(2)}}{r_1^{l+2}} + l B_{lm}^{(2)} r_1^{l-1} \right] - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \gamma} (C_{lm}^{(1)} i_l'(\gamma r_1) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_1)), \quad (27)$$

$$\varepsilon_2 \left[-(l+1) \frac{A_{lm}^{(2)}}{r_2^{l+2}} + l B_{lm}^{(2)} r_2^{l-1} \right] - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \gamma} (C_{lm}^{(1)} i_l'(\gamma r_2) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_2)) = \varepsilon_m \left[-(l+1) \frac{A_{lm}^{(3)}}{r_2^{l+2}} + f_{lm}'(r_2) \right], \quad (28)$$

$$-(l+1) \frac{A_{lm}^{(2)}}{r_1^{l+2}} + l B_{lm}^{(2)} r_1^{l-1} - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma} (C_{lm}^{(1)} i_l'(\gamma r_1) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_1)) = -\frac{kT}{2en} [(C_{lm}^{(1)} \gamma i_l'(\gamma r_1) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_1))], \quad (29)$$

$$-(l+1) \frac{A_{lm}^{(2)}}{r_2^{l+2}} + l B_{lm}^{(2)} r_2^{l-1} - \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma} (C_{lm}^{(1)} i_l'(\gamma r_2) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_2)) = \frac{kT}{2en} [\gamma (C_{lm}^{(1)} i_l'(\gamma r_2) + C_{lm}^{(2)} k_l'(\gamma r_2))]. \quad (30)$$

Система рівнянь (25)–(30) дозволяє знайти невідомі коефіцієнти розкладів потенціалів, після чого останні знаходяться підсумовуванням відповідних рядів.

З наведених формул неважко отримати вирази для суцільної кулі з напівпровідникового матеріалу. Для цього слід замінити відповідні індекси наступним чином: $3 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 1$, а у виразі для загального розв'язку рівняння Пуассона (15) слід покласти $A_{lm}^{(2)} = 0$. Найбільш цікавими є коефіцієнти $A_{lm}^{(3)}$ при збурному потенціалі, який визначає l -польну поляризованість частинки.

4. Однорідне поле. Докладніше розглянемо випадок, коли поле діє вздовж вісі z і на нескінченно великій відстані від кулі переходить в однорідне, тобто

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{E}_0 \text{ при } r \rightarrow \infty. \quad (31)$$

В цьому випадку задача має осьову симетрію, розв'язки не залежать від координати φ , і сферичні функції перетворюються на поліноми Лежандра [6]. Більш того, у зв'язку з тим, що потенціал зовнішнього поля має вигляд $\phi_e = E_0 r \cos \theta + \text{const}$, то в розкладах шуканих потенціалів слід покласти $l=1, m=0$. Отже, відповідно до асимптотичної умови $B_3 = -E_0$, і будемо мати таке представлення розв'язків

$$\phi_1(r, \theta) = B_1 r \cos \theta, \quad \phi_3(r, \theta) = \left(\frac{A_3}{r^2} - E_0 r \right) \cos \theta. \quad (32)$$

З використанням формул для модифікованих сферичних функцій Бесселя першого порядку [6, 7] розв'язок (14), набуває вигляду

$$\mu(r, \theta) = \left[C_1 e^{\gamma r} \left(1 - \frac{1}{\gamma r} \right) + C_2 e^{-\gamma r} \left(1 + \frac{1}{\gamma r} \right) \right] \frac{\cos \theta}{\gamma}, \quad (33)$$

де C_1, C_2 – довільні сталі, що співпадає з результатами, наведеними в [4]. Отже має місце наступне представлення для потенціалу в напівпровідниковій оболонці

$$\phi_2 = U(r, \theta) = \left(\frac{A_2}{r^2} + B_2 r \right) \cos \theta - \frac{4\pi e}{\varepsilon_2 \gamma^2} \left[C_1 e^{\gamma r} \left(1 - \frac{1}{\gamma r} \right) + C_2 e^{-\gamma r} \left(1 + \frac{1}{\gamma r} \right) \right] \frac{\cos \theta}{\gamma}. \quad (34)$$

Розв'язки диференціальних рівнянь побудовані, и задача зводиться до визначення сталих $C_1, C_2, B_1, B_2, A_2, A_3$. Для їх знаходження маємо систему (25)–(30), в якій слід покласти $l = 1, m = 0$. Запишемо її у матричному вигляді

$$Ac = b, \quad (35)$$

де вектор невідомих сталих $c = [C_1, C_2, B_1, A_2, B_2, A_3]^T$, вектор правої частини $b = [0, E_0 r_2, 0, 0, \varepsilon_m E_0, 0]^T$ (індекс "T" означає транспонування), а ненульові елементи матриці мають значення

$$\begin{aligned} a_{11} &= \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^3 r_1} e^{\gamma r_1} \left(1 - \frac{1}{\gamma r_1}\right), \quad a_{12} = \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^3 r_1} e^{-\gamma r_1} \left(1 + \frac{1}{\gamma r_1}\right), \quad a_{13} = r_1, \quad a_{14} = -\frac{1}{r_1^2}, \quad a_{15} = -r_1, \\ a_{21} &= \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^3 r_2} e^{\gamma r_2} \left(1 - \frac{1}{\gamma r_2}\right), \quad a_{22} = \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^3 r_2} e^{-\gamma r_2} \left(1 + \frac{1}{\gamma r_2}\right), \quad a_{24} = -\frac{1}{r_2^2}, \quad a_{25} = -r_2, \quad a_{26} = \frac{1}{r_2^2}, \\ a_{31} &= \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2 r_1} e^{\gamma r_1} \left(1 - \frac{2}{\gamma r_1} + \frac{2}{\gamma^2 r_1^2}\right), \quad a_{32} = -\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2 r_1} e^{-\gamma r_1} \left(1 + \frac{2}{\gamma r_1} + \frac{2}{\gamma^2 r_1^2}\right), \quad a_{33} = \varepsilon_1, \quad a_{34} = \frac{2\varepsilon_2}{r_1^3}, \quad a_{35} = -\varepsilon_2, \\ a_{41} &= \frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2 r_2} e^{\gamma r_2} \left(1 - \frac{2}{\gamma r_2} + \frac{2}{\gamma^2 r_2^2}\right), \quad a_{42} = -\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2 r_2} e^{-\gamma r_2} \left(1 + \frac{2}{\gamma r_2} + \frac{2}{\gamma^2 r_2^2}\right), \quad a_{44} = \frac{2\varepsilon_2}{r_2^3}, \quad a_{45} = -\varepsilon_2, \quad a_{46} = -\frac{2\varepsilon_m}{r_2^3}, \\ a_{51} &= \left(\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} + \frac{kT}{2en}\right) \frac{e^{\gamma r_1}}{r_1} \left(1 - \frac{2}{\gamma r_1} + \frac{2}{\gamma^2 r_1^2}\right), \quad a_{52} = -\left(\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} + \frac{kT}{2en}\right) \frac{e^{-\gamma r_1}}{r_1} \left(1 + \frac{2}{\gamma r_1} + \frac{2}{\gamma^2 r_1^2}\right), \quad a_{54} = \frac{2}{r_1^3}, \quad a_{55} = -1, \\ a_{61} &= \left(\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} - \frac{kT}{2en}\right) \frac{e^{\gamma r_2}}{r_2} \left(1 - \frac{2}{\gamma r_2} + \frac{2}{\gamma^2 r_2^2}\right), \quad a_{62} = -\left(\frac{4\pi e}{\varepsilon_0 \varepsilon_2 \gamma^2} - \frac{kT}{2en}\right) \frac{e^{-\gamma r_2}}{r_2} \left(1 + \frac{2}{\gamma r_2} + \frac{2}{\gamma^2 r_2^2}\right), \quad a_{64} = \frac{2}{r_2^3}, \quad a_{66} = -1. \quad (36) \end{aligned}$$

Система рівнянь (35) дозволяє знайти довільні сталі і, відповідно, всі потенціали. При цьому, коефіцієнт A_3 є найбільш цікавим, оскільки він дає зменшений в ε_m разів дипольний момент кулі з оболонкою із напівпровідника.

Визначимо цей коефіцієнт. З останніх двох рівнянь знаходимо сталі A_1, B_1

$$A_2 = \frac{r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} [(a_{61} - a_{51})C_1 + (a_{62} - a_{52})C_2], \quad B_1 = \frac{r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left[\left(\frac{a_{61}}{r_1^3} - \frac{a_{51}}{r_2^3}\right)C_1 + \left(\frac{a_{62}}{r_1^3} - \frac{a_{52}}{r_2^3}\right)C_2 \right]. \quad (37)$$

Якщо підставити вирази (37) в рівняння (35), то отримаємо замість системи шести рівнянь систему четвертого порядку вигляду

$$b_{11}C_1 + b_{12}C_2 + r_1 B_1 = 0, \quad (38) \quad b_{21}C_1 + b_{22}C_2 + \frac{1}{r_2^2} A_3 = E_0 r_2, \quad (39)$$

$$b_{31}C_1 + b_{32}C_2 + \varepsilon_1 B_1 = 0, \quad (40) \quad b_{41}C_1 + b_{42}C_2 - \frac{2\varepsilon_m}{r_2^3} A_3 = \varepsilon_m E_0, \quad (41)$$

де коефіцієнти

$$\begin{aligned} b_{11} &= a_{11} - \frac{r_1^3 r_2^3 (a_{61} - a_{51})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{r_1^4 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{61}}{r_1^3} - \frac{a_{51}}{r_2^3}\right), \quad b_{12} = a_{12} - \frac{r_1^3 r_2^3 (a_{62} - a_{52})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{r_1^4 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{62}}{r_1^3} - \frac{a_{52}}{r_2^3}\right), \\ b_{21} &= a_{21} - \frac{r_1^3 r_2^3 (a_{61} - a_{51})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{r_1^3 r_2^4}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{61}}{r_1^3} - \frac{a_{51}}{r_2^3}\right), \quad b_{22} = a_{22} - \frac{r_1^3 r_2^3 (a_{62} - a_{52})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{r_1^3 r_2^4}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{62}}{r_1^3} - \frac{a_{52}}{r_2^3}\right), \\ b_{31} &= a_{31} + \frac{\varepsilon_2 r_2^3 (a_{61} - a_{51})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{\varepsilon_2 r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{61}}{r_1^3} - \frac{a_{51}}{r_2^3}\right), \quad b_{32} = a_{32} + \frac{\varepsilon_2 r_2^3 (a_{62} - a_{52})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{\varepsilon_2 r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{62}}{r_1^3} - \frac{a_{52}}{r_2^3}\right), \end{aligned}$$

$$b_{41} = a_{41} + \frac{\varepsilon_2 r_1^3 (a_{61} - a_{51})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{\varepsilon_2 r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{61}}{r_1^3} - \frac{a_{51}}{r_2^3} \right), \quad b_{42} = a_{42} + \frac{\varepsilon_2 r_1^3 (a_{62} - a_{52})}{2(r_2^3 - r_1^3)} - \frac{\varepsilon_2 r_1^3 r_2^3}{2(r_2^3 - r_1^3)} \left(\frac{a_{62}}{r_1^3} - \frac{a_{52}}{r_2^3} \right). \quad (42)$$

З рівнянь (38)–(40) виключимо сталі C_1, C_2 і отримаємо систему

$$c_{11} B_1 + \frac{1}{r_2^2} A_3 = r_2 E_0, \quad (43), \quad c_{21} B_1 - \frac{2\varepsilon_m}{r_2^3} A_3 = \varepsilon_m E_0, \quad (44)$$

де

$$c_{11} = b_{21} \frac{\varepsilon_1 b_{12} - r_1 b_{32}}{b_{11} b_{32} - b_{12} b_{31}} - b_{22} \frac{\varepsilon_1 b_{11} - r_1 b_{31}}{b_{11} b_{32} - b_{12} b_{31}}, \quad c_{21} = b_{41} \frac{\varepsilon_1 b_{12} - r_1 b_{32}}{b_{11} b_{32} - b_{12} b_{31}} - b_{42} \frac{\varepsilon_1 b_{11} - r_1 b_{31}}{b_{11} b_{32} - b_{12} b_{31}}. \quad (45)$$

Нарешті з системи (43)–(44) знаходимо сталу A_3 , яка визначає поляризованість кулі з напівпровідниковою оболонкою

$$A_3 = r_2^3 \frac{c_{21} r_2 - \varepsilon_m c_{11}}{c_{21} r_2 + 2\varepsilon_m c_{11}} E_0. \quad (46)$$

5. Поляризованість суцільної напівпровідникової кулі і визначення ефективної діелектричної проникності. З наведених формул неважко отримати вирази і для суцільної кулі з напівпровідникового матеріалу. Наведемо також спеціальні формули [4]. З вимоги регулярності розв'язку (35) в центрі кулі випливає, що $C_1 = C_2 = C$, і тому для суцільної кулі буде:

$$\mu(\vec{r}) = \frac{C \cos \theta}{r} \left(\operatorname{ch} \gamma r - \frac{\operatorname{sh} \gamma r}{\gamma r} \right).$$

Тоді вираз для потенціалу кулі приймає вигляд

$$\phi(\vec{r}) = B_1 r \cos \theta - \frac{4\pi C \cos \theta}{\varepsilon_1 \gamma^3 r} \left(\operatorname{ch} \gamma r - \frac{\operatorname{sh} \gamma r}{\gamma r} \right). \quad (47)$$

Для визначення сталих отримаємо рівняння

$$B_1 + \frac{kT}{2\pi n \varepsilon_1} \frac{i\omega}{D \gamma^2 a} \left(\operatorname{ch} \gamma a - \frac{\operatorname{sh} \gamma a}{\gamma a} \right) C = 0, \quad (48)$$

де зовнішній радіус кулі $a = r_1$.

З умови неперервності потенціалу на поверхні кулі маємо

$$B_1 a - \frac{4\pi C}{\varepsilon_1 \gamma^3 a} \left(\operatorname{ch} \gamma a - \frac{\operatorname{sh} \gamma a}{\gamma a} \right) C = 0, \quad (49)$$

а з умови неперервності нормальної компоненти індукції випливає, що

$$\varepsilon_1 \left[-B_1 a + \frac{4\pi C}{\varepsilon_1 \gamma^2} \left(\operatorname{ch} \gamma a + \frac{2\operatorname{sh} \gamma a}{\gamma^2 a^2} - \frac{2\operatorname{ch} \gamma a}{\gamma a} \right) C \right] = \varepsilon_m \left(a E_0 + \frac{2A_2}{a^2} \right). \quad (50)$$

З цих співвідношень для сталої A_2 отримаємо вираз

$$A_2 = a^3 E_0 \frac{1 - \varepsilon^* + \beta}{1 + 2\varepsilon^* - 2\beta}, \quad (51)$$

де

$$\varepsilon^* = \varepsilon_m / \varepsilon_1, \quad \beta = \varepsilon^* \frac{\kappa^2 [3 + \gamma^2 a^2] \operatorname{th} \gamma a - 3\gamma a}{\gamma^2 [2 + \gamma^2 a^2] \operatorname{th} \gamma a - 2\gamma a}. \quad (52)$$

Коефіцієнт A_2 є зменшений в ε_m разів дипольний момент кулі. Після знаходження поляризованості відносно ефективну діелектричну проникність ε МДС можна знайти за формулою Максвелла

$$\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_m \left(1 + 3f \frac{1 - \varepsilon_1 + \beta}{1 + 2\varepsilon_1 - 2\beta} \right), \quad (53)$$

або за формулою Максвелл-Гарнетта

$$\frac{\tilde{\varepsilon} - \varepsilon_m}{\tilde{\varepsilon} + 2\varepsilon_m} = f\alpha/a^3, \quad (54)$$

де f - об'ємна доля включень, $\alpha = \varepsilon_m A_3$ - поляризованість.

6. Чисельні результати. Деякі результати розрахунків частотної залежності дійсної ε' і уявної ε'' частин ефективної діелектричної проникності МДС з напівпровідниковими суцільними сферами наведено на рис.2-5. При розрахунках приймалося, що радіус $a = 50$ нм, коефіцієнт дифузії $D = 25 \text{ см}^2 \text{ с}^{-1}$, концентрація носіїв $n = 10^{14} \text{ м}^{-3}$ [8], об'ємна доля включень $f = 0,1$ (рис. 2,3) і $f = 0,2$ (рис. 4,5). Розрахунки були виконані за формулами Максвелла (53) і Максвелл-Гарнетта (54) для різних значень діелектричної проникності кулі.

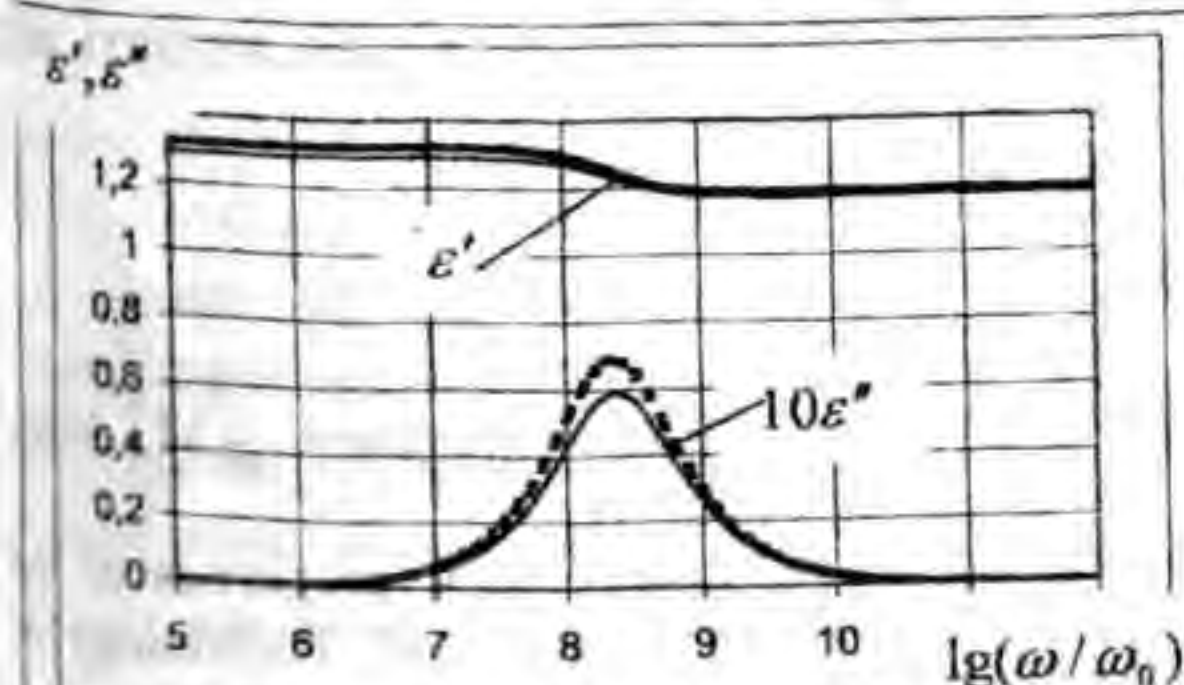


Рис.2. Залежність дійсної і уявної частин ефективної діелектричної проникності від частоти ($\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_m = 1$, $f = 0,1$, $\omega_0 = 10^6 \text{ Гц}$):
— наближення Максвелла;
--- наближення Максвелл-Гарнетта.

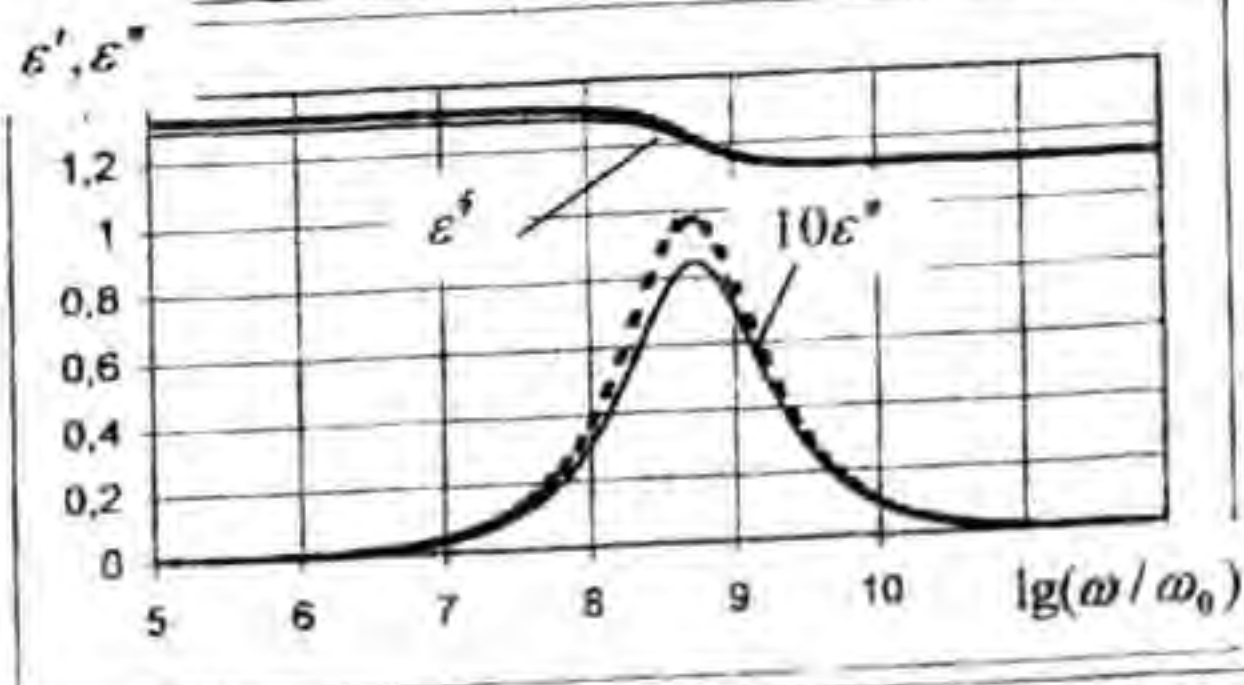


Рис.3. Залежність дійсної і уявної частин ефективної діелектричної проникності від частоти ($\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_m = 1$, $f = 0,1$, $\omega_0 = 10^6 \text{ Гц}$):
— наближення Максвелла;
--- наближення Максвелл-Гарнетта.

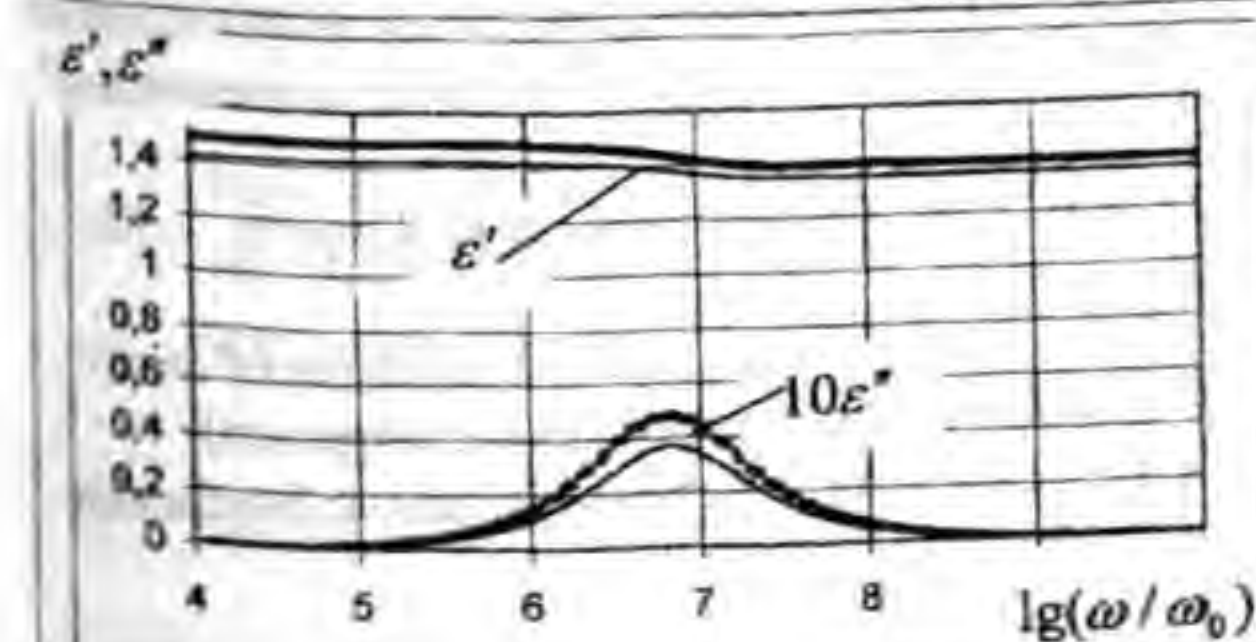


Рис.4. Залежність дійсної і уявної частин ефективної діелектричної проникності від частоти ($\varepsilon_1 = 5$, $\varepsilon_m = 1$, $f = 0,2$, $\omega_0 = 10^6 \text{ Гц}$):
— наближення Максвелла;
--- наближення Максвелл-Гарнетта.

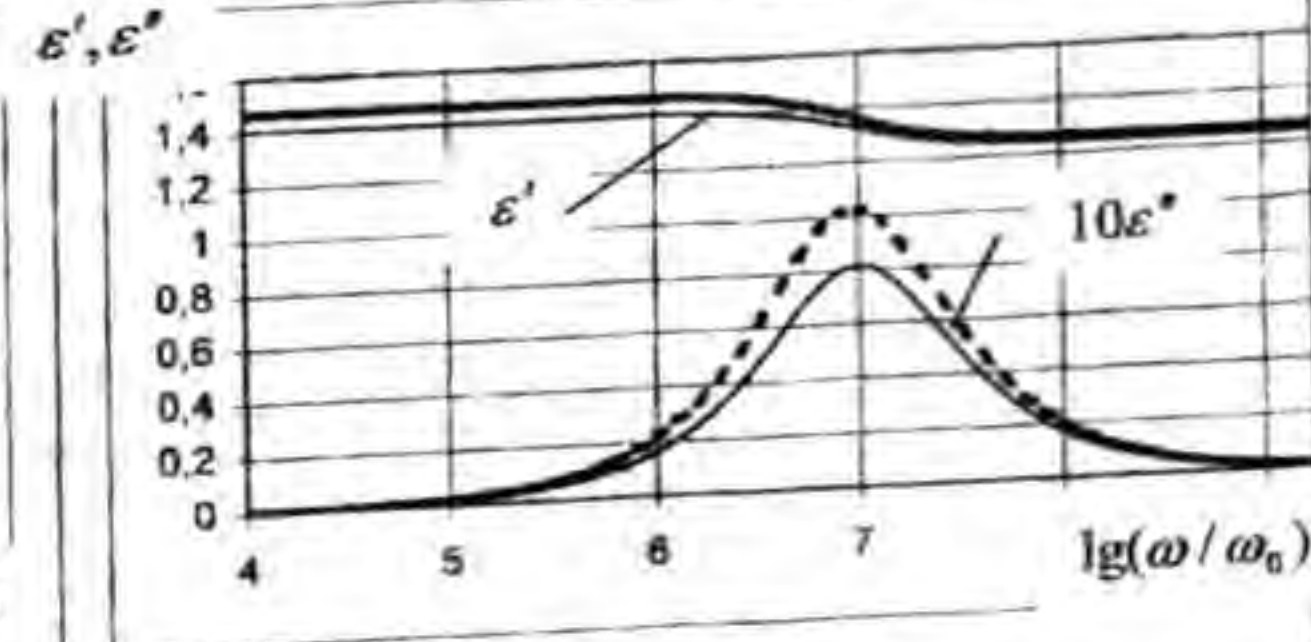


Рис.5. Залежність дійсної і уявної частин ефективної діелектричної проникності від частоти ($\varepsilon_1 = 3$, $\varepsilon_m = 1$, $f = 0,2$, $\omega_0 = 10^6 \text{ Гц}$):
— наближення Максвелла;
--- наближення Максвелл-Гарнетта.

З наведених даних випливає, що обидві формули визначають резонансну частоту однаково, але формула Максвелл-Гарнетта дає на 16% - 18% більше значення уявної частини діелектричної проникності в максимумі у порівнянні з формулою Максвелла. Розрахунки показали, що збільшення об'ємної долі включень приводить до зсуву максимуму уявної частини в область більш низьких частот.

7. Висновки. Таким чином, в роботі розраховано поляризованість діелектричної кулі з напівпровідниковою оболонкою в електричному полі, яке гармонічно змінюється у часі. Знайдено частотні залежності ефективної діелектричної функції матрично-дисперсних систем з такими включеннями в однорідному полі. Наведені чисельні результати свідчать про ефективність розробленого підходу. При цьому встановлено, що ефективна діелектрична проникність МДС з напівпровідниковими включеннями визначається Дебасвською релаксацією з екстремумом уявної частини в частотному діапазоні $(6,5-8,6) \cdot 10^{12}$ Гц в залежності від концентрації і розміру включень.

Література

1. К. Борен., Д. Хафмен. Поглощение и рассеяние света маленькими частицами. – М.: Мир, 1986. – 664 с.
2. L.G. Grechko, N.G. Malnev, N.G., Shkoda, S.V. Shostak Electrodynamical properties of the matrix disperse systems with two-layered inclusions// Chemistry, Physics and Technology of Surfaces. – 2002, V.7. – P. 89-95.
3. Л. Г. Гречко, Л. Б. Лерман, О.Я. Покотило, Н. Г. Шкода, С. В. Шостак. Узагальнений метод ефективного середовища для розрахунку діелектричної проникності неоднорідних середовищ // Вісник Київського університету. Сер.фіз.-мат. – 2005. – №3. – С.402-412.
4. Э.М. Трухан. Дисперсия диэлектрической проницаемости гетерогенных систем // Физика твердого тела. – 1962. – Т. 4, № 12. С. 3496-3511.
5. Л.Б. Лерман Л. Б., О.Я. Покотило, Д.Л. Водоп'янов, Л.Г. Гречко. Ефективна діелектрична проникність матричних дисперсних систем з напівпровідниковими кульовими включеннями // Всеукраїнська конференція молодих вчених "Наноматеріали в хімії, біології та медицині". 24-25 травня 2006 р. – Київ, - 2006. - С. 165-167.
6. Справочник по специальным функциям. Под редакцией М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979. – 831 с.
7. L.G. Grechko, L.B. Lerman, O.Ya. Pokotylo, N.G. Shkoda. 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, №4. – P. 351-358.
8. Р.Смйт. Полупроводники. – М.: Мир, 1988. – 558 с.

Надійшло в редакцію 5.06.2006.

УДК 535.375.54

Губанов В.О.¹,
Білий М.М.,
Дмитренко О.П.,
Ковригін С.В.,
Комарова Л.О.,
Куліш М.П.,
Лізунова С.В.,
Покропивний В.В.

Хіральна анізотропія коливальних мод вуглецевих нанотрубок та її прояв у спектрах комбінаційного розсіяння світла

Вперше аналітично розраховано форми фундаментальних нормальних коливань нескінченних крісельних (3, 3) та зигзагних (3, 0) вуглецевих одностінних нанотрубок (C-SWNT). Виявлено ефект хіральної анізотронії коливальних мод симетрії A_1^* , що призводить до виникнення дублету в спектрі КР світла в області 1585 cm^{-1} . Величина хірного розщеплення визначається діаметрами крісельних та зигзагних NT.

З даних комп'ютерних розрахунків зроблено висновок, що компонента дублету 1584.4 cm^{-1} обумовлена коливанням $(A_1^*)_2$ крісельних NT, де зміщення атомів перпендикулярні осям трубок, а компонента 1560.5 cm^{-1} – коливанням $(A_1^*)_1$ зигзагних NT, при якому зміщення атомів паралельні осям трубок.

Показано, що інтенсивності компонент хірного дублету можна використовувати для діагностики хірного складу NT, а величини хірного розщеплення – для діагностики їх діаметрів.

Gubanov V.O.,
Biliy M.M.,
Dmytrenko O.P.,
Kovrygin C.V.,
Komarova L.O.,
Kulish M.P.,
Lizunova S.V.,
Pokropyvnyi V.V.

Chiral anisotropy of vibrational modes of carbon nanotubes and its appearance in Raman spectra

The forms of fundamental normal vibrations of infinitely carbon single-walled armchair (3, 3) and zigzag (3, 0) nanotubes (C-SWNT) have been calculated analytically the first. The effect of chiral anisotropy of vibrational modes of A_1^* symmetry have been appeared, which reduces to emergence of doublet in Raman spectrum about of 1585 cm^{-1} . The value of chiral splitting is determined by diameters of armchair and zigzag NT.

It is concluded from data of computer calculations that the component of doublet 1584.4 cm^{-1} is provided of $(A_1^*)_2$ vibration of armchair NT, in which displacements of atoms is perpendicular to tube axis. Component 1560.5 cm^{-1} is provided of $(A_1^*)_1$ vibration of zigzag NT, at that the displacement of atoms is parallel to tube axis.

It is shown that the intensities of chiral doublet components can be used for diagnostics of NT chiral compound and the values of chiral splitting can be used for diagnostics their diameters.

Ключові слова: крісельні та зигзагні нанотрубки, форми фундаментальних нормальних коливань, хіральне розщеплення, графен, макромолекулярний клас.

Key words: armchair and zigzag nanotubes, forms of fundamental normal vibrations, chiral splitting, graphene, macromolecular class.

¹E-mail: gubanov@univ.kiev.ua

Незважаючи на те, що вуглецеві нано- та мікротрубки (C-NT або CNT) синтезовані вже давно [1], їх часто незвичайні фізичні властивості, які визначаються, перш за все, квазіодномірністю (квазі-1D) та одновимірною (1D) періодичністю структури, досліджені як експериментально, так і теоретично, ще явно недостатньо. Навіть симетрії та числа коливальних мод, що активні в спектрах інфрачервоного (IR) поглинання та комбінаційного розсіяння (RS) світла для нескінчених за довжиною одностінних (SW) CNT (SW C-NT, SWCNT або C-SWNT) – фундаментальних коливальних мод C-SWNT, в залежності від їх хіральності були встановлені зовсім недавно [2, 3].

В даній роботі ми, з використанням техніки оператора проектування, побудували форми фундаментальних ($\lambda \rightarrow \infty$) нормальних коливань, які відповідають Γ -точкам одновимірних зон Брилуена для C-SWNT різної хіральності, і показали, що тонка структура експериментально спостережуваних їх IR- та RS-спектрів обумовлена накладанням (мультиплікацією) IR- та RS-спектрів трубок різної хіральності. Однакові за симетрією і однотипні за структурною побудовою (такі, що відповідають однотипним лінійним комбінаціям із симетризованих зміщень або координат симетрії) коливальні стани характеризуються різними для трубок, що відрізняються хіральністю, формами коливань і, як наслідок, різними наборами коливальних частот.

Природно, що фундаментальні коливальні та такі, що відповідають довгохвильовому наближенню, електронні стани 1D-періодичних за структурою і нескінчених за довжиною C-SWNT треба класифікувати за незвідними представленнями точкової групи симетрії, яку створюють елементи, що переводять напрямки для C-SWNT в еквівалентні. Точкову групу з таких елементів можна назвати „макромолекулярним класом”.

Цей термін є зручним як для опису нескінчених однопериодичних структур, таких як нанотрубки, квантові дроти або полімерні ланцюги, що в якості елементів симетрії містять одновимірну підгрупу трансляцій, так і для опису нескінчених шарових пакетів, які є двоперіодичними (періодичними за двома неколінеарними напрямками) структурами з двовимірною трансляційною симетрією. Називаючи 1D- і 2D-періодичні структури макромолекулами, ми можемо легко уявити, як за допомогою двовимірної або одновимірної упаковок трансляційно еквівалентних блоків з цих структур можна створити 3D-періодичні (періодичні за трьома некопланарними напрямками) кристали з

тривимірною трансляційною симетрією, які додатково можна назвати трубчастими, ланцюговими або шаруватими. Термін „макромолекулярний клас” для 1D- і 2D-періодичних структур, таким чином, можна розглядати як доповнення до терміну „кристалічний клас”, що характеризується групою симетрії еквівалентних напрямків для 3D-періодичних структур – кристалів.

Слід, однак, підкреслити, що всі вказані вище 1D-, 2D- і 3D-періодичні структури, взагалі кажучи, тривимірні і їх симетрія описується тривимірними просторовими групами симетрії. Число таких груп для 1D-періодичних структур є нескінченним, в той час як для 2D-періодичних структур маємо 80 тривимірних просторових груп симетрії (діперіодичні просторові групи симетрії Е.А. Вуд [4]), а для 3D-періодичних структур їх число сягає 230 (групи Федорова-Шенфліса). Цікаво відмітити, що саме точковим групам, що характеризують симетрію макромолекулярних класів для структур з 1D- і 2D-періодичністю, ізоморфні фактор-групи їх просторових груп симетрії за їх інваріантними підгрупами трансляцій.

Симетрія нескінченних C-SWNT, а відтак симетрія та розподіл нормальних коливальних мод за незвідними представленнями груп симетрії суттєво залежать від їх діаметра і хіральності – напрямку вісі згортання графенового шару при утворенні CNT. Обидві ці характеристики вказують одним, що визначає компоненти перпендикулярного до осі згортання NT хірального вектора, символом (n, m) [5, 6], де n і m є додатні цілі числа або нуль.

Серед різних хіральних напрямків, які характеризуються правими або лівими гвинтовими осями симетрії, є два найбільш високосиметричні ахіральні напрямки – напрямок (n, n) , що називають „крісельним” (armchair), і напрямок $(n, 0)$, що називають „зигзагним” (zigzag). Відповідно до цього нанотрубки (n, n) мають назву „крісельних”, а $(n, 0)$ – „зигзагних”.

Якщо врахувати, що просторові групи симетрії нескінченних C-SWNT містять гвинтові осі і площини ковзаючого відбивання, то легко бачити, що симетрії макромолекулярних класів крісельних та зигзагних трубок з однаковим значенням n описуються одними й тими ж точковими групами D_{2nh} [2, 3]. При цьому розподіли фундаментальних коливальних мод для крісельних та зигзагних C-SWNT за типами симетрії із-за відмінностей їх атомних структур, що визначаються хіральністю, для кожної з груп D_{2nh} виявляються різними [3].

Ми вперше звертаємо увагу на те, що розподіл фундаментальних коливальних мод за типами симетрії груп D_{2nh} є суттєво різним для груп з непарним і парним n . Ця різниця зумовлена, в першу чергу, тим, що групи D_{2nh} з парним n мають структуру, яка відрізняється від структури груп D_{2nh} з непарним n . При цьому структури груп D_{2nh} з парним n дещо відрізняються для парних і непарних значень $n/2$.

В даній роботі ми розглянемо розподіл фундаментальних коливальних мод крісельної і зигзагної C-SWNT з непарним n за незвідними представленнями групи D_{2nh} .

В якості крісельної C-SWNT з непарним n виберемо, як приклад, NT (3, 3),

а в якості зигзагної з непарним n – NT (3, 0).

На рис. 1 представлені: фрагмент структури у двох проекціях крісельної NT (3, 3) (а, б), розгортка фрагменту крісельної NT (3, 3) (в), фрагмент структури у двох проекціях зигзагної NT (3, 0) (г, д) та розгортка фрагменту зигзагної NT (3, 0) (е). Фрагменти структур крісельної NT (3, 3) та зигзагної NT (3, 0) наведені на рис. 1 в одному й тому ж масштабі. Розгортки крісельної NT (3, 3) і зигзагної NT (3, 0) також представлені в одному масштабі, що однак відрізняється від масштабу зображення фрагментів структур. На фрагментах структур і розгортках фрагментів вказані номери атомів вуглецю, що формують елементарні комірки крісельної NT (3, 3) та зигзагної NT (3, 0). Самі ж елементарні комірки NT обрані обмеженими перпендикулярними до осей NT площинами, що містять центри інверсії (при стандартному виборі елементарних комірок в кристалах їх завжди зручно відраховувати від площин, що містять центри інверсії). В якості осей u_2 обрано осі, що лежать в перпендикулярних до осей трубок площинах, які містять точки інверсії i . Ці площини, що не є площинами симетрії, на рис. 1 позначені символом $\sigma(i)$. Цікаво, що площини симетрії σ_n не містять точок інверсії. Площини симетрії σ_n розташовані перпендикулярно до осей трубок паралельно площинам $\sigma(i)$ на однакових відстанях $|a_1|/4$ від сусідніх з ними площин $\sigma(i)$. На рис. 1 вказане також розташування всіх інших елементів симетрії групи D_{6h} відносно атомних структур крісельних і зигзагних NT з $n=3$. Суцільними тонкими лініями виділені їх елементарні комірки, відраховані від площин $\sigma(i)$, що містять точки інверсії i . На рис. 1 (б і д) зображені також ортогональні базисні вектори зміщень атомів з положень рівноваги $\vec{\varepsilon}_i$, $\vec{u}_i$ та $\vec{v}_i$, що напрямлені вздовж осей NT, вздовж радіусів NT та перпендикулярно обом з вищезазначених напрямків (на рис. 1, б вони нарисовані для атомів 1, 2 і 3, а на рис. 1, д – для атомів 1, 1', 2, 2', 3 і 3').

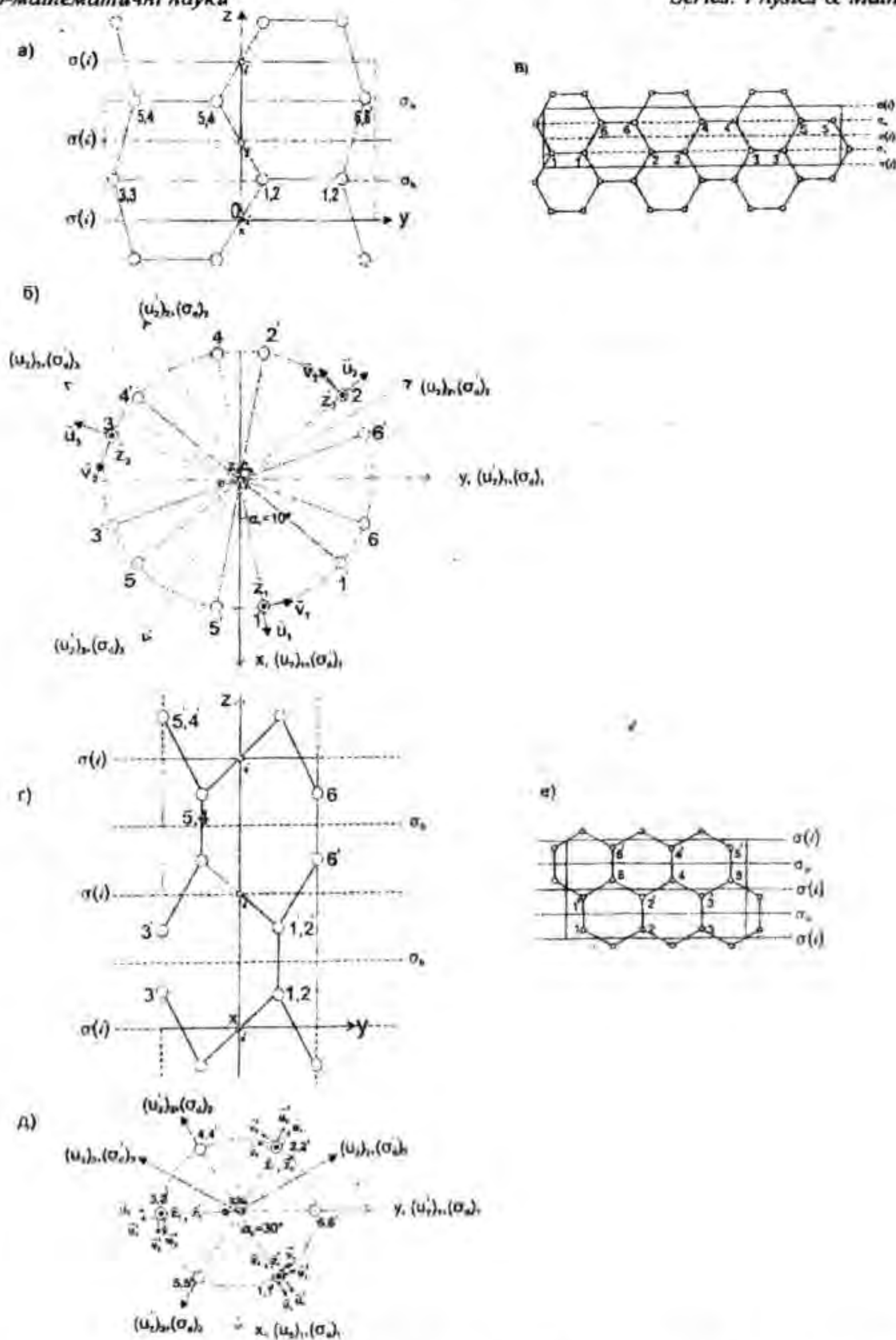


Рис. 1. Структура крісельної та зигзагної NT з $p=3$: а, б – фрагмент структури крісельної NT (3, 3) у двох проекціях; в – розгортка фрагменту структури крісельної NT (3, 3); г, д – фрагмент структури зигзагної NT (3, 0) та е – розгортка фрагменту структури зигзагної NT (3, 0).

Розподіли фундаментальних коливальних мод крісельної NT (3, 3) та зигзагної (3, 0) за незвідними представленнями групи D_{6h} , як неважко бачити, будуть наступними:

$$\Gamma_{\text{vib}}(3, 3) = 2A_1^+ + A_1^- + A_2^+ + 2A_2^- + 2A_3^+ + A_3^- + A_4^+ + 2A_4^- + 4E_1^+ + 2E_1^- + 2E_2^+ + 4E_2^-$$

і

$$\Gamma_{\text{vib}}(3, 0) = 2A_1^+ + A_1^- + 2A_2^+ + A_2^- + A_3^+ + 2A_3^- + A_4^+ + 2A_4^- + 3E_1^+ + 3E_1^- + 3E_2^+ + 3E_2^-$$

в тому числі для однакових за симетрією для крісельних і зигзагних трубок мод невластних коливань акустичного типу (трьох мод, що відповідають для $k=0$ зміщенням трубок або їх трансляціям вздовж координатних осей Oz , Ox і Oy)

$$\Gamma_{\text{ac}}(3, 3) = \Gamma_{\text{ac}}(3, 0) = A_3^- + E_2^-$$

де мода E_2^- є двократно виродженою, для моди невластних коливань торсійного типу (однієї моди, яка відповідає для $k=0$ поворотам трубок або ротаціям навколо їх осей, що співпадають з осями згорток графенових шарів або, в нашому випадку, навколо координатної осі Oz)

$$\Gamma_{\text{tors}}(3, 3) = \Gamma_{\text{tors}}(3, 0) = A_3^+$$

і для оптичних коливальних мод –

$$\Gamma_{\text{opt}}(3, 3) = 2A_1^+ + A_1^- + A_2^+ + 2A_2^- + A_3^+ + A_4^+ + 2A_4^- + 4E_1^+ + 2E_1^- + 2E_2^+ + 3E_2^-$$

і

$$\Gamma_{\text{opt}}(3, 0) = 2A_1^+ + A_1^- + 2A_2^+ + A_2^- + A_3^+ + A_4^+ + 2A_4^- + 3E_1^+ + 3E_1^- + 3E_2^+ + 2E_2^-$$

Цікаво відмітити, що для одноперіодичних кристалів, якими є нескінченні нанотрубки або нескінченні полімерні ланцюги, існують не тільки невластні фундаментальні торсійні моди, а цілі дисперсійні гілки коливальних мод торсійного типу (одна гілка для однієї нанотрубки або для одного полімерного ланцюга), що для $k \neq 0$ характеризуються частотами $\omega_{\text{tors}}(k) \neq 0$.

Згідно правилам відбору в спектрах КР і крісельної НТ (3, 3), і зигзагної НТ (3, 0) активні тільки по 8 фундаментальних нормальних коливань (з урахуванням кратностей виродження – по 14 фундаментальних коливальних мод), але з дещо іншими симетріями:

$$\Gamma_{\text{Ram}}(3, 3) = 2A_1^+ + 4E_1^+ + 2E_2^+$$

і

$$\Gamma_{\text{Ram}}(3, 0) = 2A_1^+ + 3E_1^+ + 3E_2^+$$

В спектрах ІЧ-поглинання і крісельної НТ (3, 3), і зигзагної НТ (3, 0) активні тільки по 3 фундаментальних нормальних коливання, але також – з дещо іншими симетріями:

$$\Gamma_{\text{IR}}(3, 3) = 3E_2^-$$

і

$$\Gamma_{\text{IR}}(3, 0) = A_3^- + 2E_2^-$$

(з урахуванням кратностей виродження в спектрі ІЧ-поглинання крісельної НТ (3, 3) активні 6 фундаментальних коливальних мод, а в спектрі ІЧ-поглинання зигзагної НТ (3, 0) – всього 5 фундаментальних коливальних мод).

Обчислимо тепер форми нормальних коливань. Це неважко зробити, скориставшись стандартною методикою застосування оператора проектування на незвідні представлення групи макромолекулярного класу [7] для ортогональних базисних наборів твірних функцій – векторів в просторі зміщень атомів елемен-

тарних комірок C-SWNT, що зображені на рис. 1 для крісельної NT (3, 3) і зигзагної NT (3, 0).

Спочатку розрахуємо форми нормальних коливань нескінченної крісельної C-SWNT (3, 3), симетрія макромолекулярного класу якої описується точковою групою D_{6h} . За допомогою оператора проектування на незвідні представлення групи D_{6h} визначимо симетризовані зміщення або, що те ж саме, координати симетрії – інваріантні векторні функції, що перетворюються за незвідними представленнями групи D_{6h} . Число лінійно незалежних симетризованих зміщень для кожного типу симетрії дорівнює числу коливальних мод даного типу симетрії, але симетризовані зміщення для кожного з типів симетрії не обов'язково повинні бути ортогональними – вони можуть бути і не ортогональними. Далі для кожного типу симетрії будується ортогональна система лінійних комбінацій симетризованих зміщень, і вже ця система представляє собою форми нормальних коливань.

Для нескінченної крісельної C-SWNT (3, 3) аналітичні вирази для форм фундаментальних нормальних коливань будуть наступними (коливальні моди, що є функціями-партнерами двократно вироджених коливань, позначені додатковими індексами α і β):

для симетрії A_1^-

$$S_1^{(A_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 + u_6 + u_7 + u_8 + u_9 + u_{10} + u_{11} + u_{12}),$$

$$S_2^{(A_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 + v_6 - v_7 - v_8 - v_9 - v_{10} - v_{11} - v_{12});$$

для симетрії A_1^+

$$S_1^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 - z_7 - z_8 - z_9 - z_{10} - z_{11} - z_{12});$$

для симетрії A_2^+

$$S_1^{(A_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 - z_4 - z_5 - z_6 + z_7 + z_8 + z_9 - z_{10} - z_{11} - z_{12});$$

для симетрії A_2^-

$$S_1^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 - u_4 - u_5 - u_6 - u_7 - u_8 - u_9 + u_{10} + u_{11} + u_{12}),$$

$$S_2^{(A_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1 + v_2 + v_3 - v_4 - v_5 - v_6 + v_7 + v_8 + v_9 - v_{10} - v_{11} - v_{12});$$

для симетрії A_3^+

$$S_1^{(A_3^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 + u_6 - u_7 - u_8 - u_9 - u_{10} - u_{11} - u_{12}),$$

$$S_2^{(A_3^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 + v_6 + v_7 + v_8 + v_9 + v_{10} + v_{11} + v_{12});$$

для симетрії A_3^-

$$S_1^{(A_3^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 + z_{1'} + z_{2'} + z_{3'} + z_{4'} + z_{5'} + z_{6'});$$

для симетрії A_4^+

$$S_1^{(A_4^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 - z_4 - z_5 - z_6 - z_{1'} - z_{2'} - z_{3'} + z_{4'} + z_{5'} + z_{6'});$$

для симетрії A_4^-

$$S_1^{(A_4^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 - u_4 - u_5 - u_6 + u_{1'} + u_{2'} + u_{3'} - u_{4'} - u_{5'} - u_{6'}),$$

$$S_2^{(A_4^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1 + v_2 + v_3 - v_4 - v_5 - v_6 - v_{1'} - v_{2'} - v_{3'} + v_{4'} + v_{5'} + v_{6'});$$

для симетрії E_1^+

$$S_{1\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3 - x_4 - x_5 - x_6 - x_{1'} - x_{2'} - x_{3'} + x_{4'} + x_{5'} + x_{6'}),$$

$$S_{1\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 - y_4 - y_5 - y_6 - y_{1'} - y_{2'} - y_{3'} + y_{4'} + y_{5'} + y_{6'}),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - \frac{1}{2}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3 - x_4 + \frac{1}{2}x_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 + \frac{1}{2}x_6 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6 + \\ + \frac{1}{2}x_{1'} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{1'} - x_{2'} + \frac{1}{2}x_{3'} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{3'} - \frac{1}{2}x_{4'} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{4'} + x_{5'} - \frac{1}{2}x_{6'} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{6'}),$$

$$S_{2\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 + \frac{1}{2}y_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3 + \frac{1}{2}y_3 + y_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 - \frac{1}{2}y_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6 - \frac{1}{2}y_6 - \\ - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{1'} - \frac{1}{2}y_{1'} + y_{2'} + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{3'} - \frac{1}{2}y_{3'} + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{4'} + \frac{1}{2}y_{4'} - y_{5'} - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{6'} + \frac{1}{2}y_{6'}),$$

$$S_{3\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_3 - \frac{1}{2}y_3 - y_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 + \frac{1}{2}y_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6 + \frac{1}{2}y_6 - \\ - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{1'} - \frac{1}{2}y_{1'} + y_{2'} + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{3'} - \frac{1}{2}y_{3'} + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{4'} + \frac{1}{2}y_{4'} - y_{5'} - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{6'} + \frac{1}{2}y_{6'}),$$

$$S_{3\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - \frac{1}{2}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3 - x_4 + \frac{1}{2}x_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 + \frac{1}{2}x_6 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6 - \\ - \frac{1}{2}x_{1'} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{1'} + x_{2'} - \frac{1}{2}x_{3'} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{3'} + \frac{1}{2}x_{4'} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{4'} - x_{5'} + \frac{1}{2}x_{6'} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{6'}),$$

$$S_{4\alpha}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 - y_4 - y_5 - y_6 + y_{1'} + y_{2'} + y_{3'} - y_{4'} - y_{5'} - y_{6'}),$$

$$S_{4\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-x_1 - x_2 - x_3 + x_4 + x_5 + x_6 - x_{1'} - x_{2'} - x_{3'} + x_{4'} + x_{5'} + x_{6'});$$

для симетрії E_1^-

$$S_{1\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(2z_1 - z_2 - z_3 + 2z_4 - z_5 - z_6 + z_{1'} - 2z_{2'} + z_{3'} + z_{4'} - 2z_{5'} + z_{6'}),$$

$$S_{1\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2 - z_3 + z_5 - z_6 + z_7 - z_8 + z_4 - z_6'),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2 - z_3 + z_5 - z_6 - z_7 + z_8 - z_4 + z_6'),$$

$$S_{2\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(-2z_1 + z_2 + z_3 - 2z_4 + z_5 + z_6 + z_7 - 2z_8 + z_8' + z_4' - 2z_5' + z_6');$$

для симетрії E_2^+

$$S_{1\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(2z_1 - z_2 - z_3 - 2z_4 + z_5 + z_6 - z_7 + 2z_8 - z_8' + z_4' - 2z_5' + z_6'),$$

$$S_{1\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2 - z_3 - z_5 + z_6 - z_7 + z_8 + z_4' - z_6'),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_2 - z_3 - z_5 + z_6 + z_7 - z_8 - z_4' + z_6'),$$

$$S_{2\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(-2z_1 + z_2 + z_3 + 2z_4 - z_5 - z_6 - z_7 + 2z_8 - z_8' + z_4' - 2z_5' + z_6'),$$

для симетрії E_2^-

$$S_{1\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_4' + x_5' + x_6'),$$

$$S_{1\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 + y_4' + y_5' + y_6'),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - \frac{1}{2}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3 + x_4 - \frac{1}{2}x_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 - \frac{1}{2}x_6 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6 - \frac{1}{2}x_7 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 + x_8 - \frac{1}{2}x_8' - \frac{\sqrt{3}}{2}y_8' - \frac{1}{2}x_4' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_4' + x_5' - \frac{1}{2}x_6' - \frac{\sqrt{3}}{2}y_6'),$$

$$S_{2\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 + \frac{1}{2}y_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_3 + \frac{1}{2}y_3 - y_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 + \frac{1}{2}y_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_6 + \frac{1}{2}y_6 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 + \frac{1}{2}y_7 - y_8 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_8' + \frac{1}{2}y_8' + \frac{\sqrt{3}}{2}x_4' + \frac{1}{2}y_4' - y_5' - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6' + \frac{1}{2}y_6'),$$

$$S_{3\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_3 - \frac{1}{2}y_3 + y_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 - \frac{1}{2}y_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6 - \frac{1}{2}y_6 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 + \frac{1}{2}y_7 - y_8 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_8' + \frac{1}{2}y_8' + \frac{\sqrt{3}}{2}x_4' + \frac{1}{2}y_4' - y_5' - \frac{\sqrt{3}}{2}x_6' + \frac{1}{2}y_6'),$$

$$S_{3\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 - \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - \frac{1}{2}x_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_3 + x_4 - \frac{1}{2}x_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 - \frac{1}{2}x_6 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6 + \frac{1}{2}x_7 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 - x_8 + \frac{1}{2}x_8' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_8' - \frac{1}{2}x_4' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_4' - x_5' + \frac{1}{2}x_6' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_6'),$$

$$S_{4\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 - y_7 - y_8 - y_4' - y_5' - y_6'),$$

$$S_{4\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5 - x_6 + x_7 + x_8 + x_4' + x_5' + x_6').$$

На рис. 2 (а, б) наведено графічне зображення форм фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної C-SWNT (3, 3).

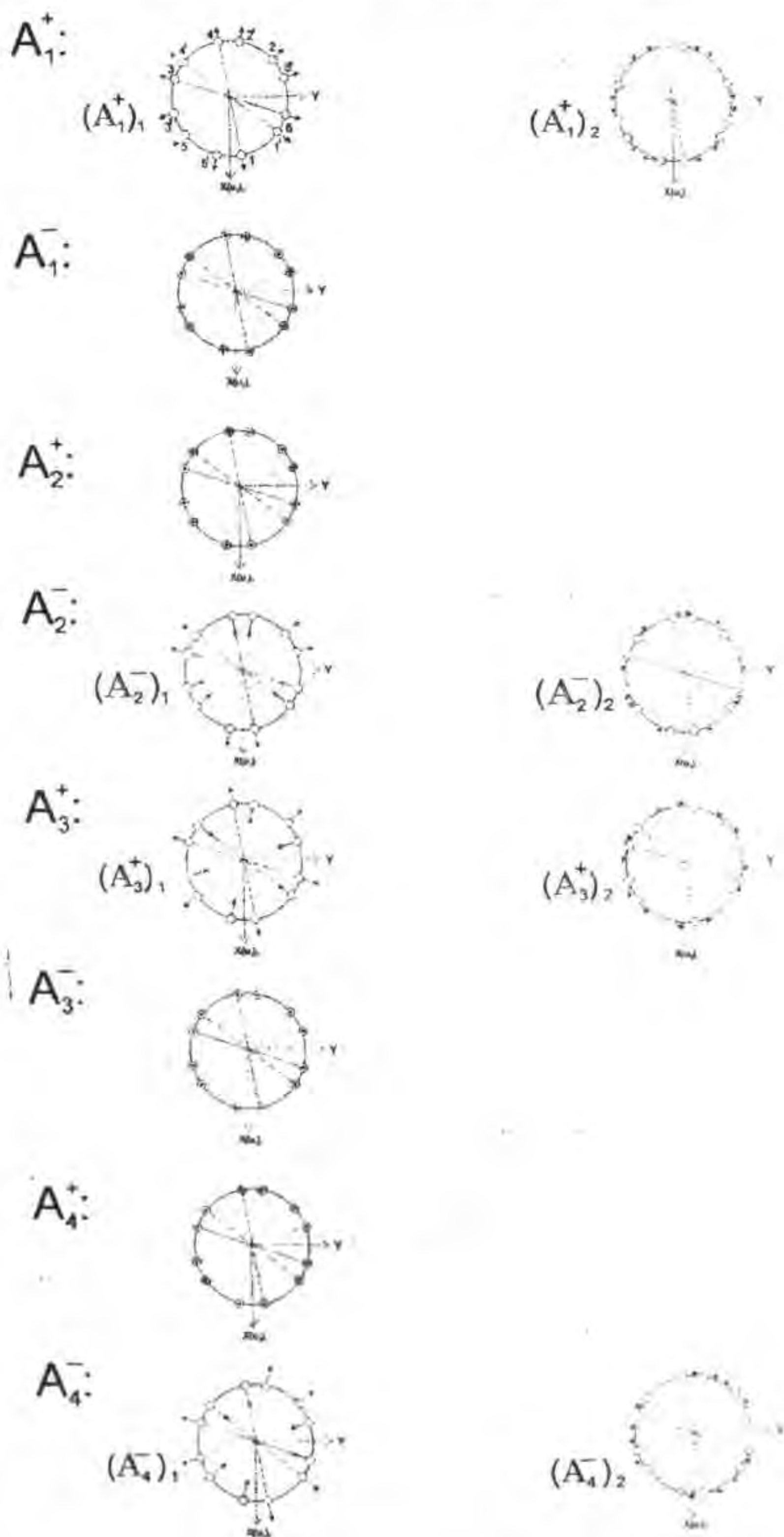


Рис. 2, а. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної C-SWNT (3, 3) для невинроджених коливань.

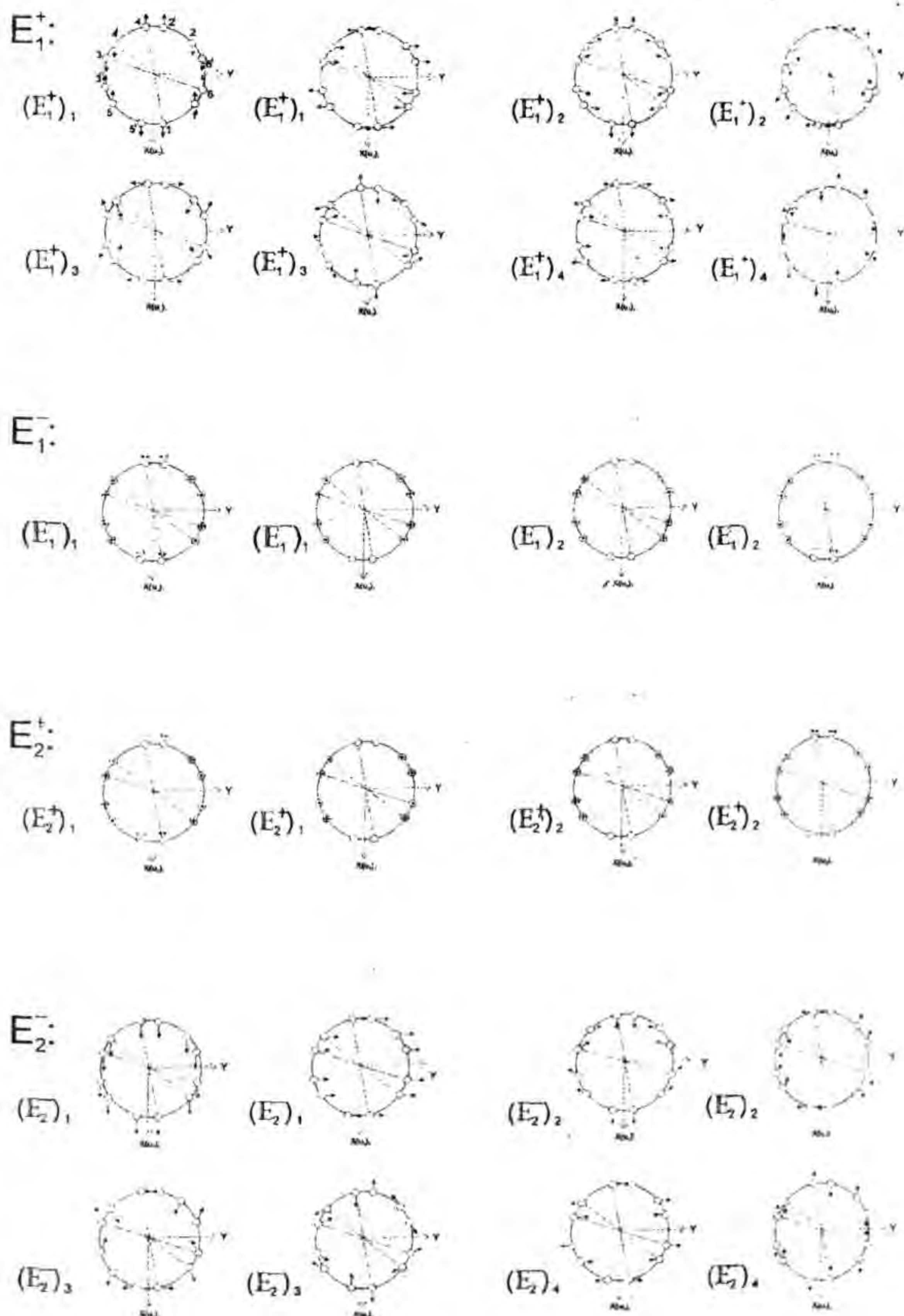


Рис. 2, б. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної крісельної C-SWNT (3, 3) для двократно вироджених коливань.

З рис. 2 (а, б) легко бачити, що дві фундаментальні коливальні моди симетрії A_1^+ відповідають “дихальному” колюванню [мода $(A_1^+)_1$], коли всі атоми вуглецю, що формують елементарну комірку C-SWNT, рухаються перпендикулярно осі NT синфазно від центра NT вздовж радіусів, на яких вони знаходяться, та “валентному” (наближено) колюванню [мода $(A_1^+)_2$], коли атоми вуглецю рухаються теж перпендикулярно осі NT назустріч один одному, хоч і на різних висотах (рівнях) в елементарних комірках, вздовж дотичних, що проведені перпендикулярно до рівних за величиною радіусів, які характеризують їх рівноважні положення. Одна з фундаментальних коливальних мод симетрії A_1^+ [мода $(A_1^+)_2$] відповідає невласному ротаційному колюванню $(A_1^+)_2$ (rot), що є фундаментальним (при $k=0$) невласним колюванням торсійної гілки колювань ω_{tors} , фундаментальна мода A_1^- відповідає невласному трансляційному (вздовж осі трубки) колюванню, що є фундаментальним невласним колюванням акустичної гілки колювань $\omega_{LO}(ac)$. Фундаментальні моди симетрій E_1^+ і E_2^- [моди $(E_1^+)_1$ і $(E_2^-)_1$] є компонентами трансляційного двократно виродженого колювання, що є фундаментальним невласним колюванням акустичної гілки колювань $\omega_{TO}(ac)$] відповідають колюванням, що формується зміщеннями атомів, перпендикулярними до осі трубки, а фундаментальні моди симетрії E_2^+ – колюванням, які формуються зміщеннями атомів вздовж осі NT.

Тепер розрахуємо форми фундаментальних нормальних колювань нескінченної зигзагної C-SWNT (3, 0). Симетрія макромолекулярного класу цієї нанотрубки, як і симетрія макромолекулярного класу крісельної C-SWNT (3, 3), також описується точковою групою D_{6h} .

Аналітичні вирази для форм фундаментальних нормальних колювань C-SWNT (3, 0), як неважко бачити, будуть наступними:

для симетрії A_1^+

$$S_1^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 - z_{1'} - z_{2'} - z_{3'} - z_{4'} - z_{5'} - z_{6'}),$$

$$S_2^{(A_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 + u_6 + u_{1'} + u_{2'} + u_{3'} + u_{4'} + u_{5'} + u_{6'});$$

для симетрії A_1^-

$$S_1^{(A_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(v_1 + v_2 + v_3 + v_4 + v_5 + v_6 - v_{1'} - v_{2'} - v_{3'} - v_{4'} - v_{5'} - v_{6'});$$

для симетрії A_2^+

$$S_1^{(A_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 - z_4 - z_5 - z_6 + z_{1'} + z_{2'} + z_{3'} - z_{4'} - z_{5'} - z_{6'}),$$

$$S_2^{(A_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(u_1 + u_2 + u_3 - u_4 - u_5 - u_6 - u_{1'} - u_{2'} - u_{3'} + u_{4'} + u_{5'} + u_{6'});$$

для симетрії A_2^-

$$S^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_4 - \mathbf{v}_5 - \mathbf{v}_6 + \mathbf{v}_7 + \mathbf{v}_2' + \mathbf{v}_3' - \mathbf{v}_4' - \mathbf{v}_5' - \mathbf{v}_6');$$

для симетрії A_3^+

$$S^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3 + \mathbf{v}_4 + \mathbf{v}_5 + \mathbf{v}_6 + \mathbf{v}_7 + \mathbf{v}_2' + \mathbf{v}_3' + \mathbf{v}_4' + \mathbf{v}_5' + \mathbf{v}_6');$$

для симетрії A_3^-

$$S_1^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 + z_4 + z_5 + z_6 + z_7 + z_2' + z_3' + z_4' + z_5' + z_6'),$$

$$S_2^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_3 + \mathbf{u}_4 + \mathbf{u}_5 + \mathbf{u}_6 - \mathbf{u}_7 - \mathbf{u}_2' - \mathbf{u}_3' - \mathbf{u}_4' - \mathbf{u}_5' - \mathbf{u}_6');$$

для симетрії A_4^+

$$S^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_3 - \mathbf{v}_4 - \mathbf{v}_5 - \mathbf{v}_6 - \mathbf{v}_7 - \mathbf{v}_2' - \mathbf{v}_3' + \mathbf{v}_4' + \mathbf{v}_5' + \mathbf{v}_6');$$

для симетрії A_4^-

$$S_1^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(z_1 + z_2 + z_3 - z_4 - z_5 - z_6 - z_7 - z_2' - z_3' + z_4' + z_5' + z_6'),$$

$$S_2^{(A_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(\mathbf{u}_1 + \mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_3 - \mathbf{u}_4 - \mathbf{u}_5 - \mathbf{u}_6 + \mathbf{u}_7 + \mathbf{u}_2' + \mathbf{u}_3' - \mathbf{u}_4' - \mathbf{u}_5' - \mathbf{u}_6');$$

для симетрії E_1^+

$$S_{1a}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(z_1 + z_2 - 2z_3 + z_4 + z_5 - 2z_6 - z_7 - z_2' + 2z_3' - z_4' - z_5' + 2z_6'),$$

$$S_{1\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(-z_1 + z_2 - z_4 + z_5 + z_7 - z_2' + z_4' - z_5'),$$

$$S_{2a}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 + y_3 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_4 + \frac{1}{2}y_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 + \frac{1}{2}y_5 - y_6 + \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 - \frac{1}{2}y_7 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2' - \frac{1}{2}y_2' + y_3' - \frac{\sqrt{3}}{2}x_4' + \frac{1}{2}y_4' + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5' + \frac{1}{2}y_5' - y_6'\right),$$

$$S_{2\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(-\frac{1}{2}x_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_1 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 + x_3 + \frac{1}{2}x_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_4 + \frac{1}{2}x_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 - x_6 - \right. \\ \left. - \frac{1}{2}x_7 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 - \frac{1}{2}x_2' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_2' + x_3' + \frac{1}{2}x_4' + \frac{\sqrt{3}}{2}y_4' + \frac{1}{2}x_5' - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5' - x_6'\right),$$

$$S_{3a}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 - y_4 - y_5 - y_6 + y_7 + y_2' + y_3' - y_4' - y_5' - y_6'),$$

$$S_{3\beta}^{(E_1^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-x_1 - x_2 - x_3 + x_4 + x_5 + x_6 - x_7 - x_2' - x_3' + x_4' + x_5' + x_6');$$

для симетрії E_1^-

$$S_{1a}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_1 - z_2 + z_4 - z_5 + z_7 - z_2' + z_4' - z_5'),$$

$$S_{1\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(z_1 + z_2 - 2z_3 + z_4 + z_5 - 2z_6 + z_7 + z_2' - 2z_3' + z_4' + z_5' - 2z_6'),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3 - x_4 - x_5 - x_6 - x_7 - x_8 - x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12}),$$

$$S_{2\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 - y_4 - y_5 - y_6 - y_7 - y_8 - y_9 + y_{10} + y_{11} + y_{12}),$$

$$S_{3\alpha}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{1}{2}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - x_3 - \frac{1}{2}x_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_4 - \frac{1}{2}x_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 + x_6 - \frac{1}{2}x_7 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 - \frac{1}{2}x_8 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_8 + x_9 + \frac{1}{2}x_{10} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{10} + \frac{1}{2}x_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{11} - x_{12}\right),$$

$$S_{3\beta}^{(E_1^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 + y_3 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_4 + \frac{1}{2}y_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 + \frac{1}{2}y_5 - y_6 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 + \frac{1}{2}y_7 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_8 + \frac{1}{2}y_8 - y_9 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{10} - \frac{1}{2}y_{10} - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{11} - \frac{1}{2}y_{11} + y_{12}\right);$$

для симетрії E_2^+

$$S_{1\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(z_1 + z_2 - 2z_3 - z_4 - z_5 + 2z_6 + z_7 + z_8 - 2z_9 - z_{10} - z_{11} + 2z_{12}),$$

$$S_{1\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(-z_1 + z_2 + z_4 - z_5 - z_7 + z_8 + z_{10} - z_{11}),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 + y_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_4 - \frac{1}{2}y_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 - \frac{1}{2}y_5 + y_6 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 + \frac{1}{2}y_7 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_8 + \frac{1}{2}y_8 - y_9 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{10} + \frac{1}{2}y_{10} + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{11} + \frac{1}{2}y_{11} - y_{12}\right),$$

$$S_{2\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}\left(-\frac{1}{2}x_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_1 - \frac{1}{2}x_2 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 + x_3 - \frac{1}{2}x_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_4 - \frac{1}{2}x_5 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 + x_6 + \frac{1}{2}x_7 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 + \frac{1}{2}x_8 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_8 - x_9 + \frac{1}{2}x_{10} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{10} + \frac{1}{2}x_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{11} - x_{12}\right),$$

$$S_{3\alpha}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 - y_7 - y_8 - y_9 - y_{10} - y_{11} - y_{12}),$$

$$S_{3\beta}^{(E_2^+)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(-x_1 - x_2 - x_3 - x_4 - x_5 - x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12});$$

для симетрії E_2^-

$$S_{1\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{2}}(z_1 - z_2 - z_4 + z_5 - z_7 + z_8 + z_{10} - z_{11}),$$

$$S_{1\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{6}}(z_1 + z_2 - 2z_3 - z_4 - z_5 + 2z_6 - z_7 - z_8 + 2z_9 + z_{10} + z_{11} - 2z_{12}),$$

$$S_{2\alpha}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7 + x_8 + x_9 + x_{10} + x_{11} + x_{12}),$$

$$S_{2\beta}^{(E_2^-)} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6 + y_7 + y_8 + y_9 + y_{10} + y_{11} + y_{12});$$

$$S_{3a}^{(\bar{k}_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2}x_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_1 + \frac{1}{2}x_2 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_2 - x_3 + \frac{1}{2}x_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_4 + \frac{1}{2}x_5 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_5 - x_6 + \right. \\ \left. + \frac{1}{2}x_7 + \frac{\sqrt{3}}{2}y_7 + \frac{1}{2}x_8 - \frac{\sqrt{3}}{2}y_8 - x_9 + \frac{1}{2}x_{10} + \frac{\sqrt{3}}{2}y_{10} + \frac{1}{2}x_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2}y_{11} - x_{12} \right), \\ S_{3\beta}^{(\bar{k}_1)} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\frac{\sqrt{3}}{2}x_1 - \frac{1}{2}y_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_2 - \frac{1}{2}y_2 + y_3 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_4 - \frac{1}{2}y_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_5 - \frac{1}{2}y_5 + y_6 + \right. \\ \left. + \frac{\sqrt{3}}{2}x_7 - \frac{1}{2}y_7 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_8 - \frac{1}{2}y_8 + y_9 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_{10} - \frac{1}{2}y_{10} - \frac{\sqrt{3}}{2}x_{11} - \frac{1}{2}y_{11} + y_{12} \right).$$

Графічне зображення форм фундаментальних нормальних коливань нескінченної зигзагної C-SWNT (3, 0) наведене на рис. 3 (а, б).

З рис. 3 (а, б) також легко бачити, що фундаментальна коливальна мода $(A_1^*)_2$ відповідає “дихальному” коливанню, мода $(A_1^*)_1$ – “валентному” коливанню, моди A_3^* , $(E_2^-)_{2\alpha}$ і $(E_2^-)_{2\beta}$ – трансляційні [фундаментальні моди гілок $\omega_{10}(ac)$ і $\omega_{10}(ac)$], а мода A_3^* – ротаційна (фундаментальна мода торсійної гілки ω_{tors}).

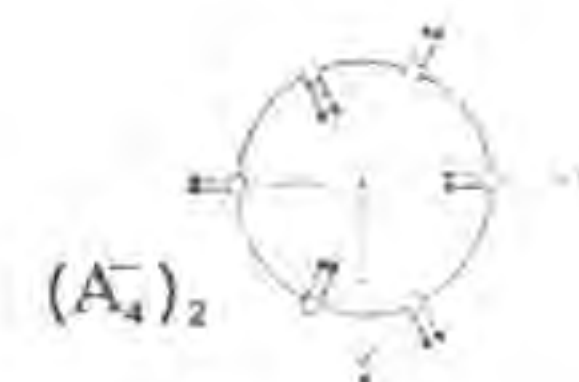
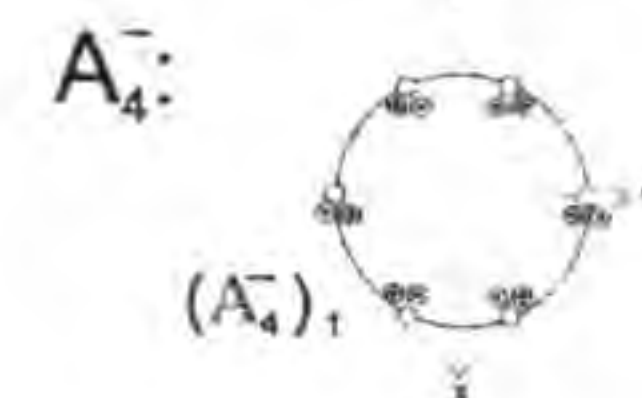
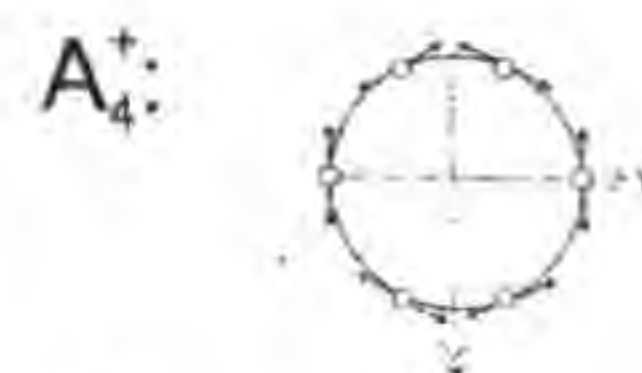
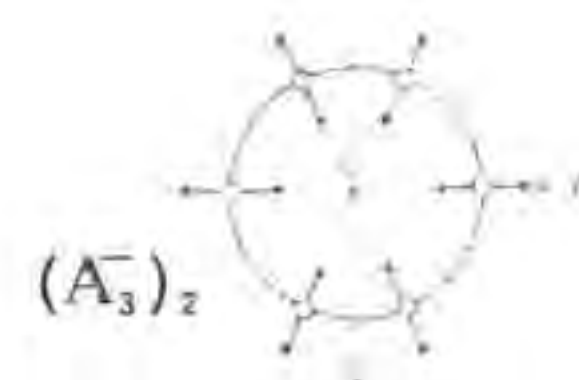
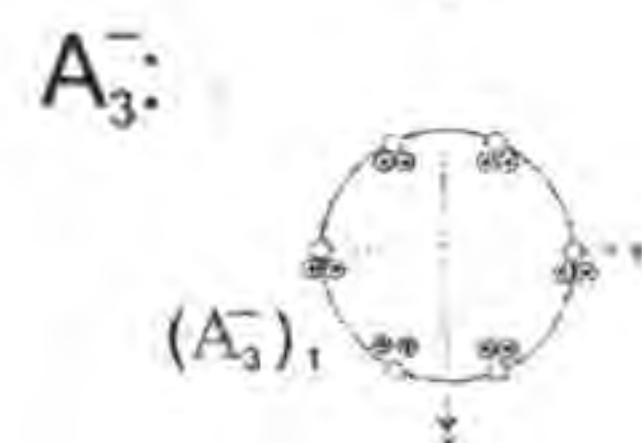
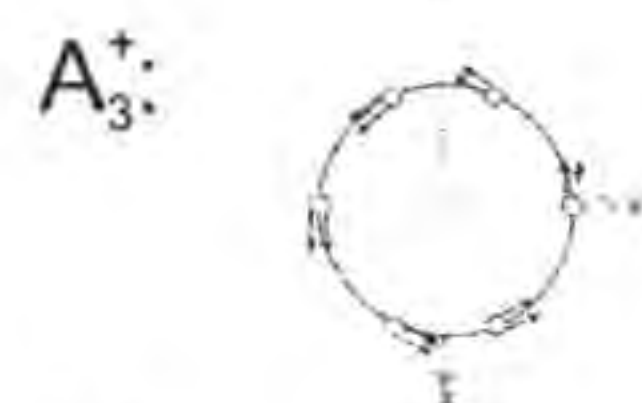
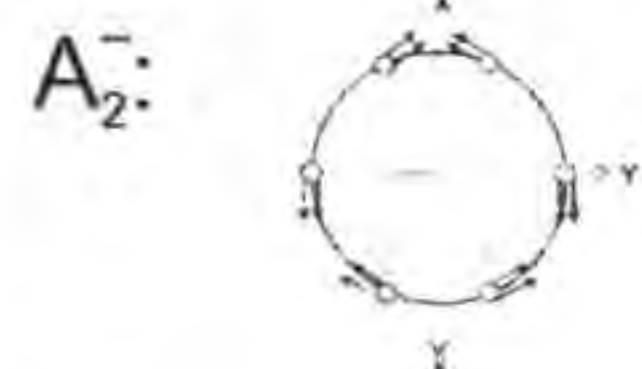
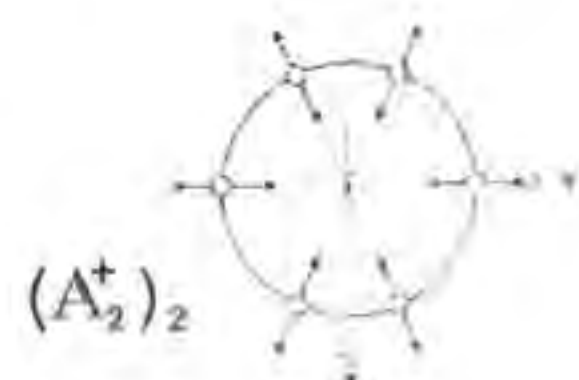
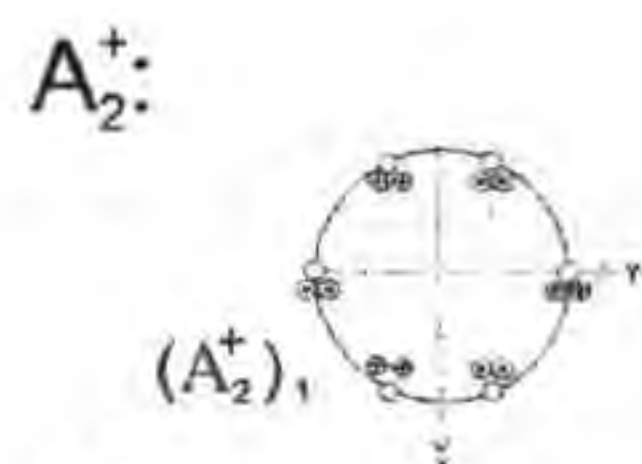
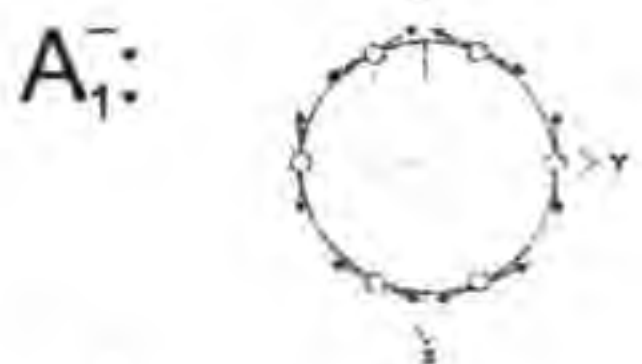
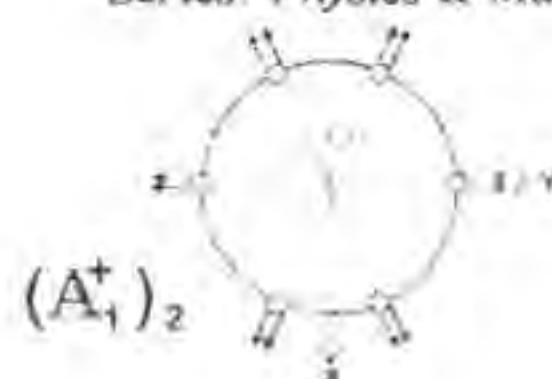
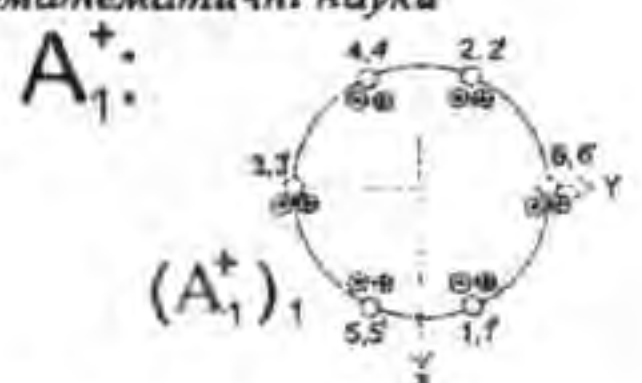


Рис. 3, а. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної зигзагної C-SWNT (3, 0) для невироджених коливань.

© В.О. Губанов та ін., 2006

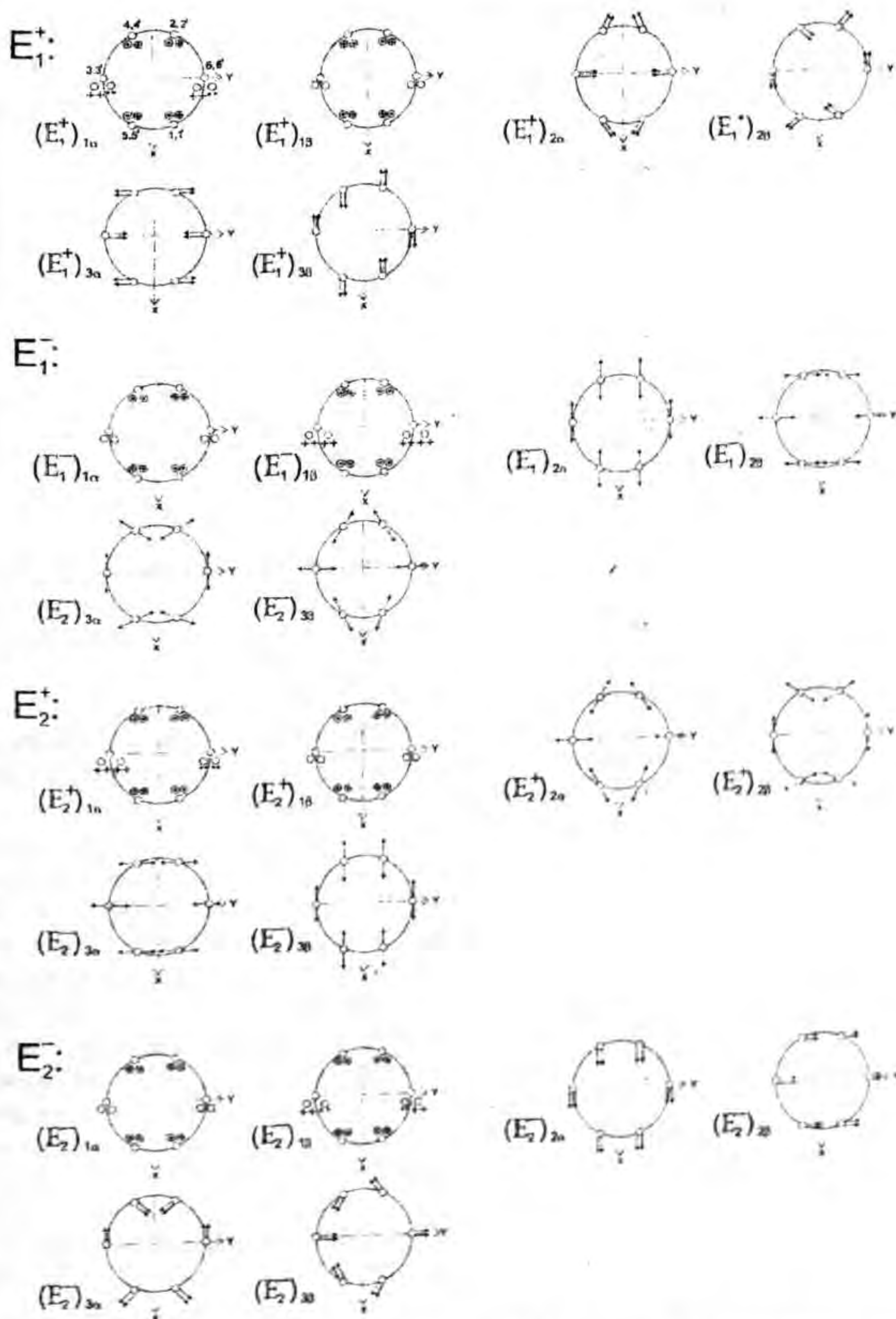


Рис. 3, б. Форми фундаментальних нормальних коливань нескінченної зигзагної C-SWNT (3, 0) для двократно вироджених коливань.

На рис. 4 зображено експериментально зареєстрований спектр КР одностінних вуглецевих нанотрубок.

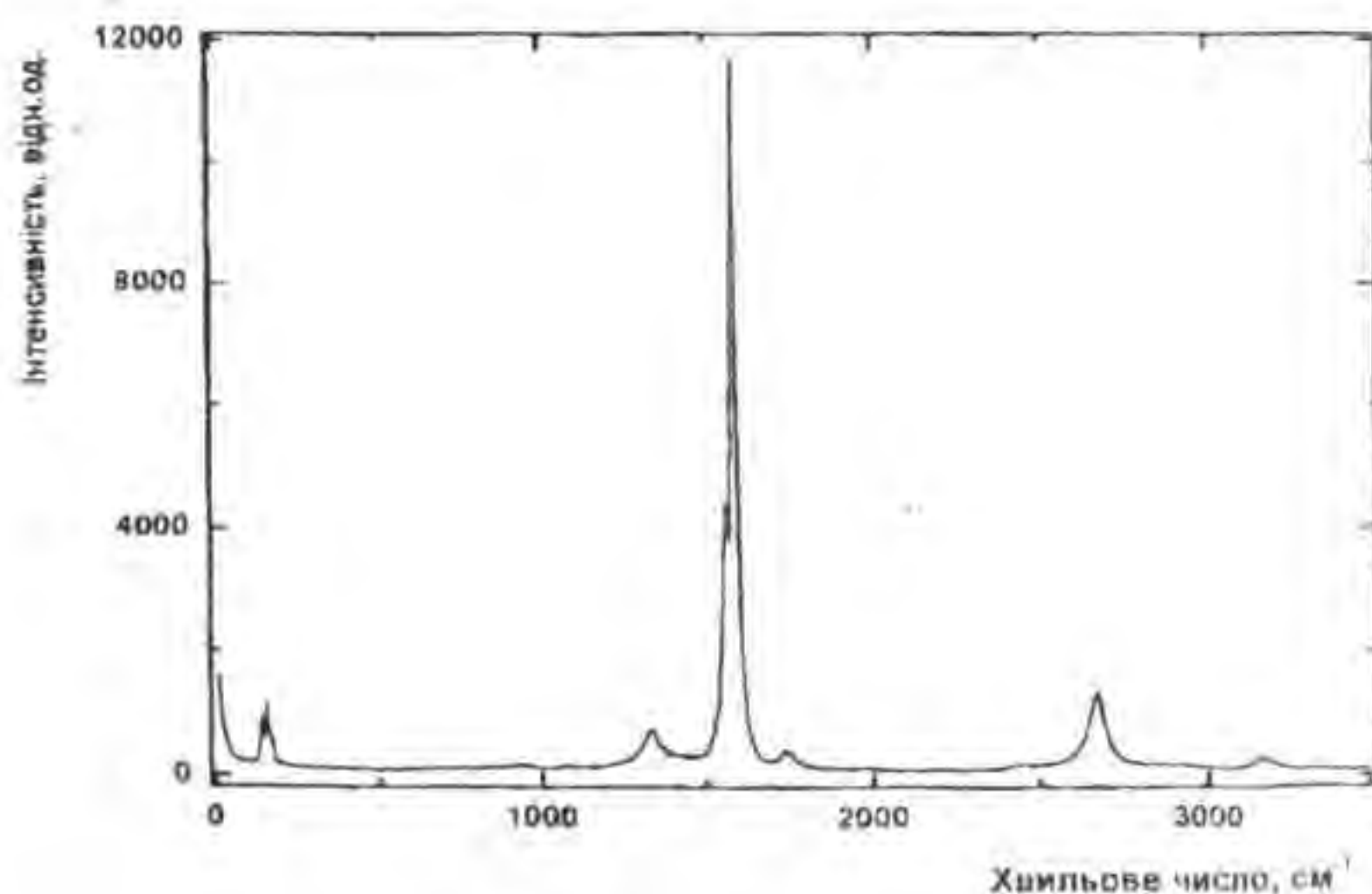


Рис. 4. Спектр КР світла одностінних вуглецевих нанотрубок.

Спектр КР C-SWNT містить квартет смуг низьких частот 145.7; 160.9; 170.2 та 178.0 cm^{-1} , дублетну смугу з компонентами 1560.5 та 1584.4 cm^{-1} , а також смуги з частотами 1338, 1735, 2667 та 3173 cm^{-1} .

Квартет низькочастотних смуг ми відносимо до розсіяння світла на "ди-хальних" коливаннях NT різного діаметру та різної хіральності. Дублетна смуга 1560.5 та 1584.4 cm^{-1} відповідає валентним коливанням NT.

Характерною рисою кристалів є значний електрооптичний анігармонізм, завдяки якому в їх спектрах КР можна очікувати на появу смуг, обумовлених КР світла другого порядку, тобто можна спостерігати смуги складених тонів та обертонів. Поява смуг такої природи в спектрах КР перш за все свідчить про те, що КР світла спостерігається саме на кристалічних структурах. Смуга 1735 cm^{-1} скоріш за все є складеним тоном, компонент квартету $\sim 161 \text{ cm}^{-1}$ та дублету 1584.4 cm^{-1} , а смуги 2667 cm^{-1} та 3173 cm^{-1} є обертонами смуг 1338 та 1584.4 cm^{-1} . Практично точне подвоєння частоти обертону 3173 cm^{-1} порівняно з основним тоном та незначне збільшення півширини обертонової смуги відносно півширини смуги основного тону свідчать про незначну дисперсію "валентного" коливання в одновимірній зоні Брилуена C-SWNT. Смуга 1338 cm^{-1} та її обертон належать спектру невпорядкованого, скоріше всього аморфного, вуглецю [8].

Розглянемо детальніше тонку структуру смуги 1584.4 cm^{-1} , що майже точно співпадає за частотою зі смугою спектра КР монокристалічного графіту, яка обумовлена двократно виродженим коливанням графенового шару 1585 cm^{-1} .

На рис. 5 зображена тонка структура дублетної смуги 1560.5 та 1584.4 cm^{-1} . Легко бачити, що кожна з компонент цього дублету в свою чергу складається принаймні з двох смуг. Компонента дублета 1560.5 cm^{-1} містить смуги 1548.0 і 1560.3 cm^{-1} , а компонента 1584.4 cm^{-1} – смуги 1584.3 і 1592.2 cm^{-1} .

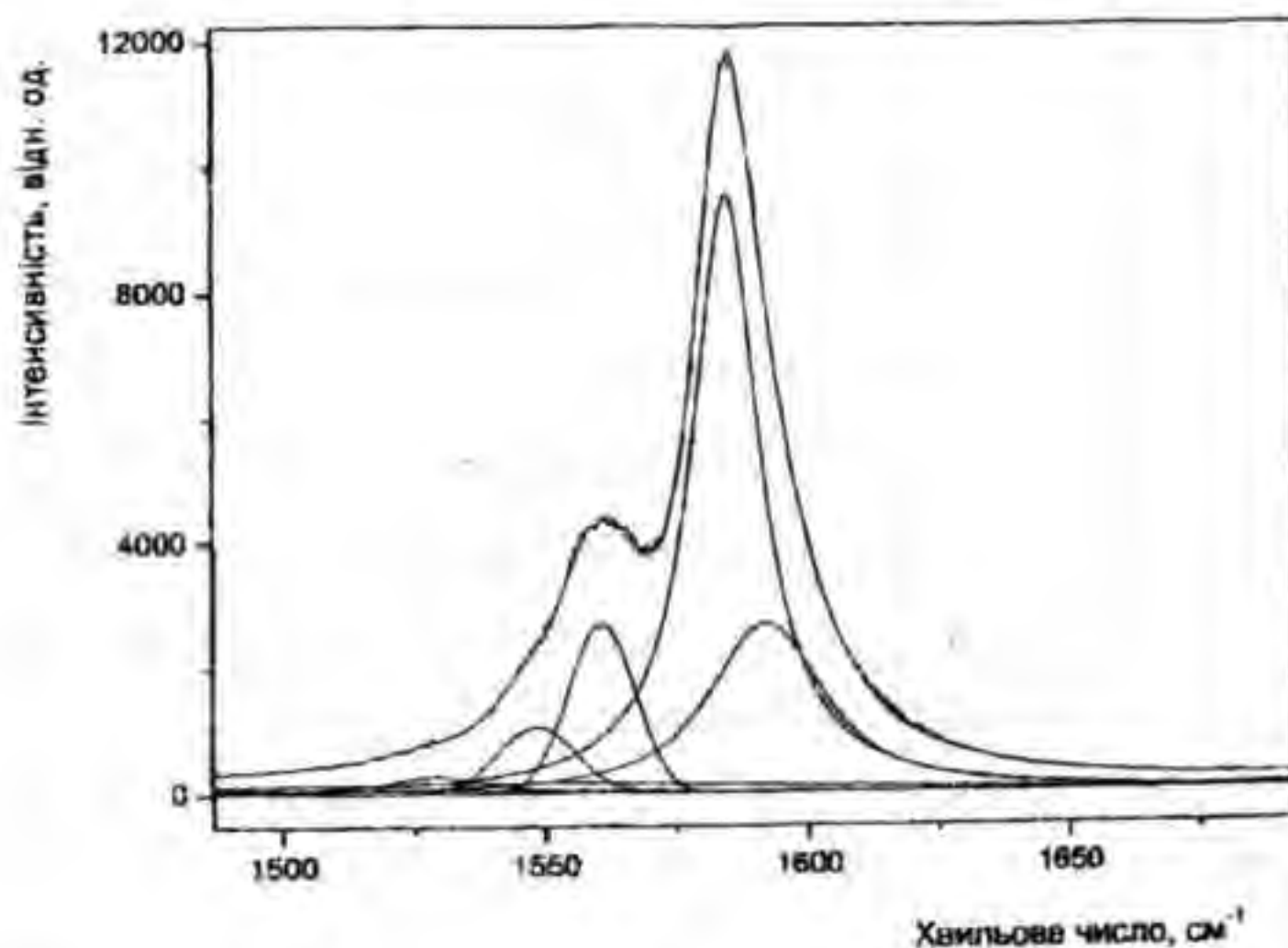


Рис.5. Тонка структура спектру КР світла одностінних вуглецевих нанотрубок.

Тонка структура компонент дублету, як і величини розщеплення, визначається діаметрами NT – чим менше діаметри, тим більше розщеплення компонент дублету. В нашому випадку діаметри C-SWNT в грубому наближенні групуються в околі двох їх значень, тому тонка структура кожної з компонент дублету складається з двох смуг.

Добре відомо [6], що завдяки sp^2 гібридизації атомних орбіталей вуглецю утворюється така його алотропна форма, як кристалічний графіт, що відноситься до структур з гексагональною ґраткою (позначається символом $h-C$). Всі структурні форми графіту є шаруватими кристалами, що складаються з макромолекул – однакових нескінчених двоперіодичних шарових пакетів – шарів із атомів вуглецю, що впорядковані у площині в структуру «бджолиних сот». Ці гексагональні шарові пакети – шари або моношари – з атомів вуглецю мають спеціальну назву – графен (C_{gr}). Наприклад, елементарна комірка відомої структурної форми графіту – графіту Бернала ($\gamma-C$) містить атоми двох однакових, але трансляційно нееквівалентних, графенових шарів.

Симетрія графенового шару (графену) C_{gr} описується просторовою дигіперіодичною групою $DG80 [P\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m} (P6/m2/m2/m \text{ або, скорочено, } P6/mmm)]$, графік якої (геометричне взаємне розташування елементів симетрії) співпадає з графіком триперіодичної просторової групи симетрії $D_{6h} (P\frac{6}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m} \text{ або, скорочено, } P6/mmm)$, а симетрія його макромолекулярного класу – з точковою групою $D_{6h} (P6/mmm)$. Класифікація коливальних мод C_{gr} за незвідними представленнями групи D_{6h} є наступною:

$$\Gamma_{\text{tot}} = A_2^+ + A_3^- + E_1^- + E_1^+ + E_2^-$$

в тому числі для акустичних коливань

$$\Gamma_{ac} = A_3^- + E_2^-$$

і для оптичних

$$\Gamma_{opt} = A_2^+ + E_1^+.$$

Два оптичних фундаментальних коливання C_{gr} розділяються на одне двократно вироджене E_1^+ , що описується двома виродженими фундаментальними коливальними модами, і одне не вироджене A_2^+ , якому відповідає одна фундаментальна коливальна мода. Фундаментальне коливання E_1^+ активне в спектрі КР світла C_{gr} , а фундаментальне коливання A_2^+ не активне ні в спектрі ІЧ-поглинання, ні в КР світла. Це коливання є німим і фундаментальна коливальна мода графену A_2^+ також називається німою.

З експериментальних даних по дослідженню ІЧ-поглинання світла [9, 10] і КР світла в графіті Бернала [6, 11] (смуги 1588 cm^{-1} і 1582 cm^{-1}) можна зробити висновок, що коливання E_1^+ в графені характеризується частотою $\omega_{E_1^+} \approx 1585 \text{ cm}^{-1}$.

На рис. 6 зображено форми нормальних коливань двох функцій-партнерів (суцільні вектори та пунктирні), що відповідають частоті $\omega_{E_1^+} \approx 1585 \text{ cm}^{-1}$ графену.

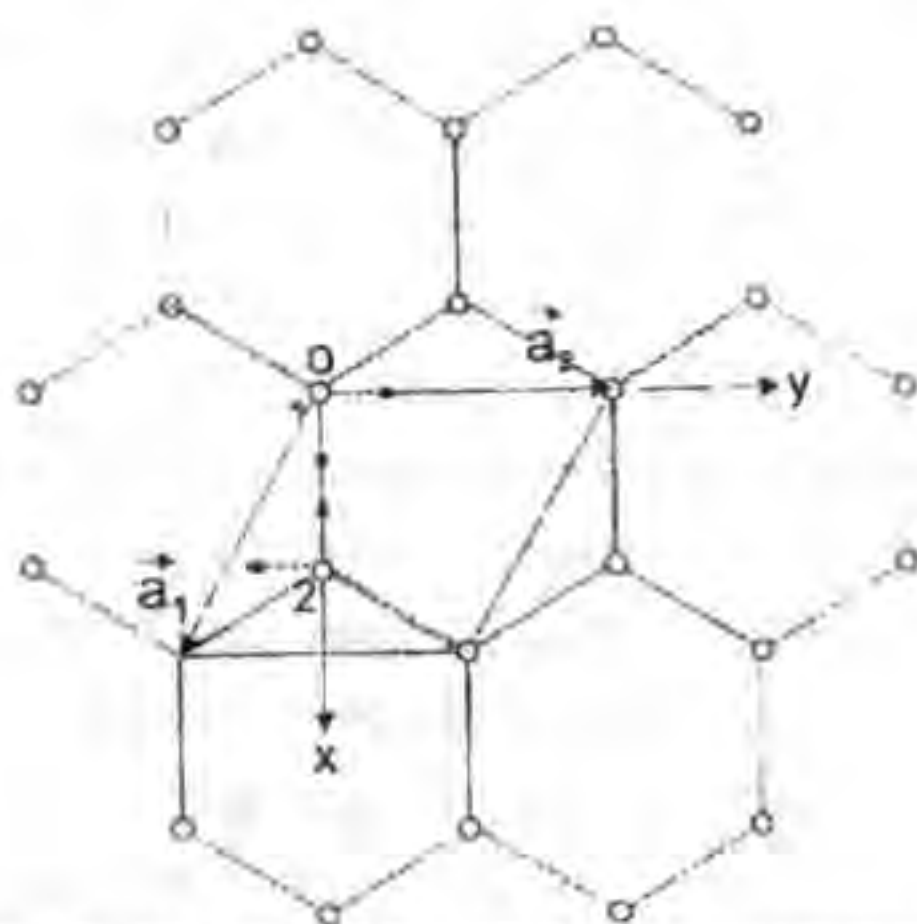


Рис. 6. Форми двократно виродженого коливання E_1^+ графенового шару. Дві вироджені коливальні моди описуються ортогональними функціями-партнерами: одна – з векторами зміщень вздовж осі Ох, друга – з векторами зміщень вздовж осі Оу.

При утворенні нанотрубок або згортанні графенового шару відбувається розщеплення моди E_1^+ на моди $(A_1^+)_2$ і A_1^- в крісельних нанотрубках і на моди $(A_1^+)_1$ і A_1^- – в зигзагних нанотрубках. При цьому зміщення атомів вуглецю в крі-

¹ Смуги $(E_2^-)_2$ в спектрах ІЧ-поглинання $\omega_{(E_2^-)_2} \approx 1588 \text{ cm}^{-1}$ [9, 10] і $(E_1^+)_2$ в спектрах КР світла $\omega_{(E_1^+)_2} \approx 1582 \text{ cm}^{-1}$ [6, 11] в графіті Бернала є данидівським дублетом, що виникає внаслідок ван-дер-ваальсівської взаємодії двох трансляційно нееквівалентних моношарів графену.

сельних NT відбувається перпендикулярно осі згортання графенового шару, а в зигзагних NT – паралельно осі згортання графенового шару. Оскільки в обох випадках, для крісельних і зигзагних NT, моди A_1^- не активні в спектрах КР світла, то розщеплення смуги 1585 см^{-1} , що характеризує коливання E_1^+ в C_{gr} , на дублет з компонентами $\omega_{(A_1^+)_1} \approx 1584.4\text{ см}^{-1}$ для крісельних NT і $\omega_{(A_1^+)_2} \approx 1560.5\text{ см}^{-1}$ для зигзагних NT можна інтерпретувати як хіральної анізотропії коливальних мод вуглецевих нанотрубок.

На рис. 7 наведено схему розщеплення двократно виродженого коливання графенового шару E_1^+ для крісельних та зигзагних C-SWNT. На цьому ж рисунку значками $\perp$ і $\parallel$ позначені напрямки векторів зміщень атомів, що формують коливання $(A_1^+)_1$ і $(A_1^+)_2$, відносно осей нанотрубок $\hat{c}$. Різниця частот фундаментальних коливань $(A_1^+)_1$ і $(A_1^+)_2$ обумовлена їх хіральною анізотропією. Дані проведені нами комп'ютерного розрахунку свідчать про те, що частоти коливань $(A_1^+)_2$ більші, ніж частоти коливань $(A_1^+)_1$. Про це свідчать і інтенсивності компонент хірального дублету: крісельні NT більш стабільні за зигзагні, їх концентрація в суміші, як правило, вища, і інтенсивність їх коливальних мод $(A_1^+)_2$ більша за інтенсивність мод $(A_1^+)_1$ зигзагних NT.

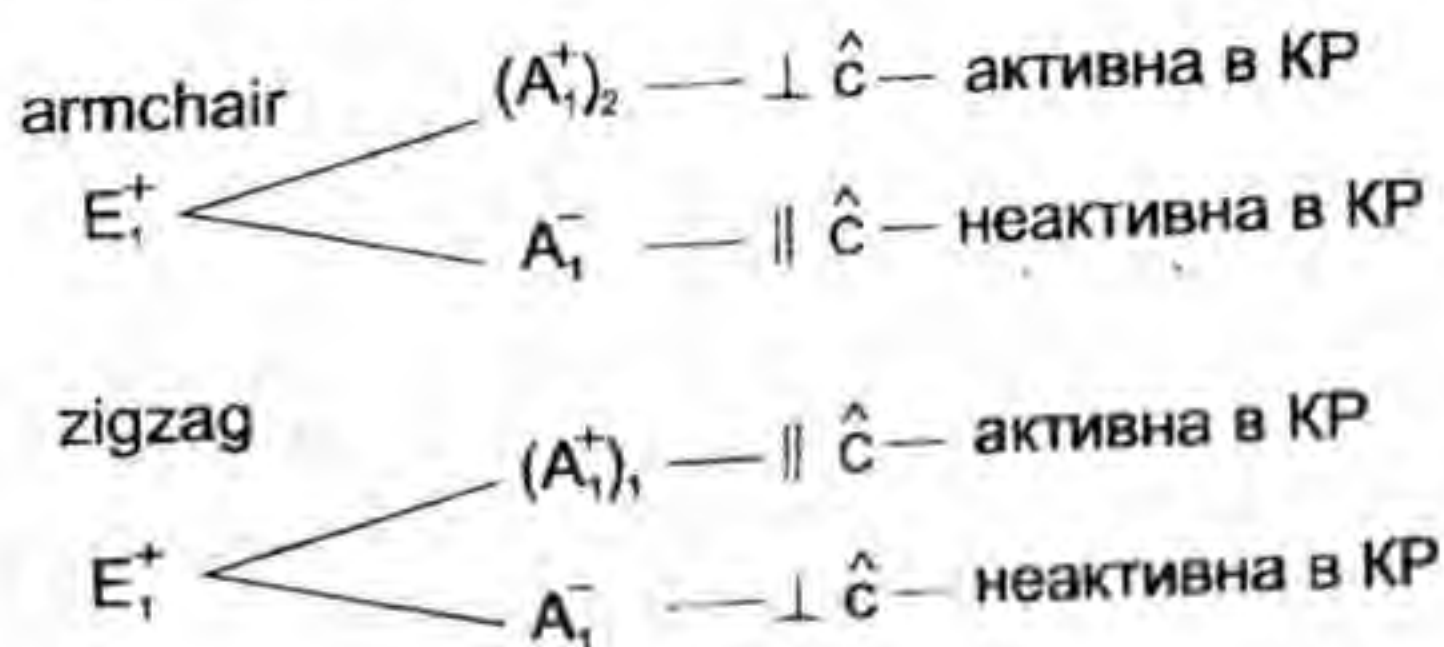


Рис. 7. Схема розщеплення двократно виродженого коливання графенового шару E_1^+ в крісельних та зигзагних C-SWNT.

В кінці роботи можна зробити наступні висновки:

1. Вперше аналітично розраховано форми фундаментальних нормальних коливань крісельної C-SWNT (3, 3) та зигзагної C-SWNT (3, 0). Виявлено, що ці коливання формуються із зміщень атомів вуглецю або виключно перпендикулярно до осей NT, або виключно вздовж осей NT.

2. Вперше виявлено ефект хіральної анізотропії коливальних мод, що зокрема для мод симетрії A_1^+ для крісельних і зигзагних NT призводить до виникнення дублету в спектрі КР світла в області 1585 см^{-1} . Таким чином вперше встановлено фізичну природу спостережуваного експериментально (для C-SWNT) дублету, як такого, що обумовлений хіральною анізотропією коливальних мод.

3. Величини хірального розщеплення визначаються діаметрами крісель-

них і зигзагних NT, що призводить до виникнення додаткової надтонкої структури компонент дублету.

4. З даних комп'ютерних розрахунків зроблено висновок про те, що компонента хірального дублету 1584.4 cm^{-1} обумовлена коливанням $(A_1^*)_2$ крісельних NT, де зміщення атомів перпендикулярні осям трубок, а компонента дублету 1560.5 cm^{-1} обумовлена коливанням $(A_1^*)_1$ зигзагних NT, при якому зміщення атомів паралельні осям трубок.

5. Інтенсивності компонент цього дублету відображають вміст крісельних та зигзагних NT в їх суміші, що дає можливість використовувати співвідношення інтенсивностей компонент дублету для хіральної діагностики NT, а величини хірального розщеплення дублету – для діагностики їх діаметрів.

Література.

1. S.Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature (London)*, **354**, 56-58 (1991).
2. M.Damnjanović, T.Vuković, I.Milošević, B.Nikolić. Symmetry of single-wall nanotubes. *Acta Crystallogr., Sect. A: Found. Crystallogr.*, **A57**, 304-310 (2001).
3. O.E.Alon. Number of Raman- and infrared-active vibrations in single-walled carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, **63**, 201403-1–201403-3 (2001).
4. E.A.Wood. The 80 diperiodic groups in three dimensions. *Bell System Techn. J.*, **43**, №1, 541-559 (1964).
5. N.Hamada, S.-I.Sawada, A.Oshijama. New one-dimensional conductors: graphitic microtubules. *Phys. Rev. Lett.*, **68**, 1579-1581 (1992).
6. M.S.Dresselhaus, G. Dresselhaus, P.C.Eklund. *Science of fullerenes and carbon nanotubes*, 965 p. Academic Press, Inc, San Diego, Boston, New York, London, Sydney, Tokyo, Toronto, 1996.
7. А.Пуле, Ж.-П.Матье. Колебательные спектры и симметрия кристаллов. Изд. «Мир», Москва, 1973, 437 с.
8. H.Jantoljak, C.Thomsen, S.Curran, S.Roth, W.Maser, C.Journet, P.Bernier. Raman spectroscopy on carbon nanotubes. *Proc. Of the Intern. Winter-school on Electronic Propert. of Novel Materials*, 1-8 March 1997, Kirchberg, Austria: *Molecular Nanostructures*, pp. 459-462. Ed. by H.Kuzmany, J.Fink, M.Mehring, S.Roth, World Scientific Publishing Company.
9. R.A.Friedel, G.L.Carlson. Infrared spectra of ground graphite. *J. Phys. Chem.*, **75**, №8, 1149-1151 (1971).
10. R.J.Nemanich, G.Lucovsky, S.A.Solin. Infrared active optical vibrations of graphite. *Sol. St. Comm.*, **23**, №2, 117-120 (1977).
11. F.Tuinstra, J.L.Koenig. Raman spectrum of graphite. *J. Chem. Phys.*, **53**, №1, 1126-1130 (1970).

Надійшла до редакції 04.04.2006

УДК 539.12.04

Оксана П. Дмитренко*, канд. фіз.-
мат. наук, доцент
Василь С. Стащук, доктор фіз.-мат.
наук, професор
Олена Л. Павленко, магістр I р.н.
Вадим І. Попенко, аспірант I р.н.

Оптична провідність твердих фулеренів C_{60} при легуванні

У роботі досліджена спектральна залежність оптичної провідності для плівок фулеренів C_{60} легованих атомами міді і молекулами кисню. Експериментальні результати оптичної провідності для використовуваних домішок вказують на різний характер їх впливу. У випадку інтеркальованого розміщення домішок кисень виступає акцептором, а атоми міді донором. При легуванні атомами міді плівок C_{60} спостерігається суттєва гібридизація електронних станів, яка не пояснюється лише присутністю інтеркальованих домішок.

Ключові слова: фулерен C_{60} , плівки, легування, оптична провідність, гібридизація станів

E-mail*: o_dmytrenko@univ.kiev.ua,

Фулерени у конденсованому стані належать до класу молекулярних кристалів зі значними параметрами ґратки. Це сприяє зануренню домішок у міжвузлові положення, тобто інтеркаляції різних хімічних елементів. З іншого боку, фулерени, особливо C_{60} , легко обмінюються зарядами з домішками, оскільки описуються значними енергіями спорідненості з електронами і малими значеннями енергії іонізації. У збудженому стані є можливим розкриття подвійних зв'язків між атомами вуглецю, що дозволяє створювати хімічну обмінну взаємодію з окремими атомами і молекулами [1]. На сьогодні детально досліджено різноманітні властивості фулеренів C_{60} , легованих лужними металами [2], у той час як легування іншими елементами досліджувалося мало [3-4]. Так спостерігається зміна температурної і часової залежності електричного опору для плівок C_{60} -C, отриманих одночасним осадженням атомарного вуглецю і фулеренів [5].

Oksana P. Dmytrenko, Dr. Ph.
Vasyl S. Stashchuk, Dr. Ph,
professor
Olena L. Pavlenko
Vadym I. Popenko

Optical conductivity of solid C_{60} at the alloying

The spectral dependence of optical conductivity for the C_{60} fullerene films, alloyed by the copper atoms and the oxygen molecules is studied. The experimental results of optical conductivity for above impurities indicate the different nature of their action. In the case of the intercalated arrangement of impurities the oxygen is an acceptor, and copper atoms are the donors. At the alloying of the C_{60} films by the copper atoms the essential hybridization of electronic states, which is not explained only by the presence of the intercalated impurities is observed.

Key Words: C_{60} films, alloying, optical conductivity, hybridization of electronic states.

Аналогічно, при одночасній конденсації вісмуту і фулеренів C_{60} при зміні параметрів осадження і змінній концентрації компонент показано, що вісмут призводить до зміни структури плівок C_{60} -Bi [6]. Зміна спектрів оптичного поглинання у питомої провідності має місце у тонких плівках C_{60} , інтеркальованих телуrom. Навіть незначний вміст домішкових атомів Te призводить до зсуву і зміни форми краю оптичного поглинання, порушенню симетрії молекули C_{60} [7].

Насичення плівок C_{60} , вирощених на підкладках міді, атомами міді і молекулами кисню, призводить до утворення комплексів $Cu_xO_yC_{60}$, що впливає на структуру тонких плівок. При цьому відмічена емісія вільних електронів від атомів міді до молекул кисню у матриці фулеренів, що визначає значне зростання дифузії атомів Cu і молекул O_2 [8]. У випадку сумісного осадження фулеренів C_{60} і атомів кобальту утворюється нанокомпозитна система, де монокристали ГЦК-Co з розмірами біля 10 нм містяться у матриці C_{60} , а також карбіди Co_2C і Co_3C [9]. Припускається, що у суміші C_{60} -Co виникає хімічна взаємодія між атомами кобальту і фулеренами, що проявляється у поведінці раманівських спектрів.

Особливий інтерес представляють властивості молекул C_{60} , що утворюють ковалентні зв'язки атомів вуглецю фулеренів з домішковими атомами чи молекулами. Так для хімічних сполук фулеренів C_{60} з бромом з'являється помітна модифікація електронного спектру поблизу краю поглинання, яка приводить до виникнення додаткового поглинання в області енергетичної щільності [10]. Ковалентні зв'язки з фулеренами утворюють атоми кисню [1], хоча можливе їх розміщення і у положеннях інтеркаляції [11-13]. Припускається, що окиснення створює глибокі локальні домішкові рівні, які зникають при термічному відпалі, що впливає на оптичні і електричні властивості плівок фулеренів C_{60} .

Видно, що у залежності від типу домішкових атомів, структура плівок фулеренів C_{60} , а також їх властивості відрізняються. У зв'язку з цим представляє інтерес вивчення впливу домішок, які знаходяться у хімічно зв'язаному й інтеркальованому станах, на оптичні властивості легованих плівок фулеренів C_{60} . Тверді C_{60} легували киснем, який може бути у двох станах, а також атомами міді, що у кристалічній ГЦК фазі C_{60} занурюються у міжвузлові положення. Насичення плівок C_{60} молекулами кисню проводилося при термічному відпалі [14], а плівки Cu- C_{60} були отримані при одночасній вакуумній конденсації на підкладки Si (100) фулеренів C_{60} і атомів міді [15]. Структура плівок досліджувалася електронно- і рентгенодифракційними методами, уявна компонента діелектричної проникності і оптична провідність вимірювалися методом еліпсометричної спектроскопії.

Варто відмітити, що легування плівок C_{60} молекулами кисню і атомами міді призводить до помітних змін у структурі. Якщо дифракційна картина у випадку легування киснем вказує лише на зростання параметра

гратки у порівнянні з чистими плівками C_{60} , то у плівках з атомами міді при її концентрації 20 ат. % уже у вихідному стані з'являється відсутній у твердих C_{60} пік (200). Навіть при низьких концентраціях міді (4 ат.%) параметр гратки стає меншим, ніж і твердих фулеренів [15-16]. З відпалом (472K на протязі 300 хвилин) при даній концентрації також з'являється дифракційний пік (200). Морфологія плівок фулеренів з міддю складніша. На відміну від плівок, легованих киснем, має місце гетерофазна структура. Крім твердого розчину $Cu-C_{60}$, спостерігається фаза Cu_2O . Плівки в обох випадках легування являють собою суміш аморфної і кристалічної структур. Вміст аморфної фази у плівках з міддю внаслідок умов приготування виявився більшим, ніж для твердих C_{60} з молекулами кисню.

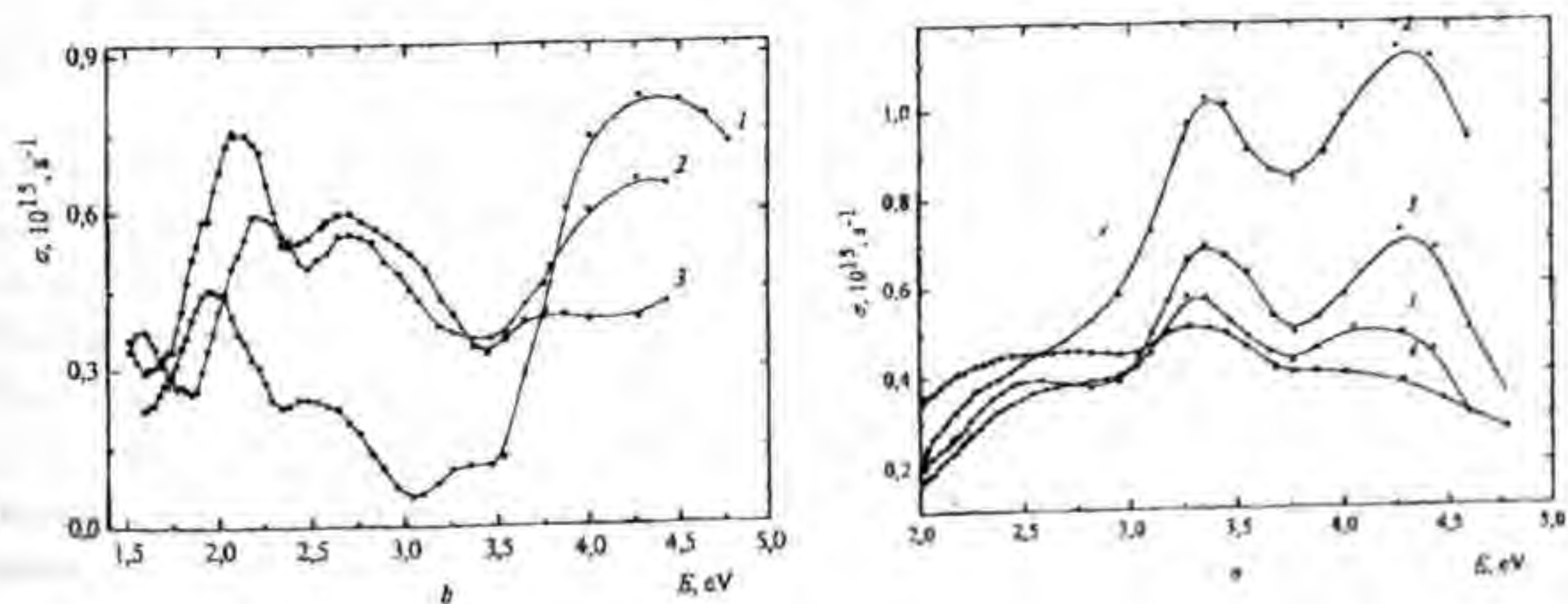


Рис. 1. Спектральна залежність оптичної провідності плівок C_{60} , легованих киснем (а) і атомами міді (20 ат. %) (б). (а) – 1 – вихідний стан напылення (Si (100), 2000 нм); 2 – відпал при 393 К на протязі 20 хв; 3 – 453 К, 60 хв; 4 – 473 К, 300 хв. (б) – 1 – вихідний стан одношарової плівки (Si (100), 100 нм); 2 – 353 К, 20 хв; 3 – 473 К, 300 хв

На рис.1 приведена спектральна залежність оптичної провідності $\sigma(\omega)$ для плівок C_{60} , легованих киснем і атомами міді [16-18]. Видно, що спектри оптичної провідності суттєво відрізняються. Це помітно, як в області енергетичної щільності, так і інтервалі енергій міжзонних переходів. Слід відмітити, що поведінка оптичної провідності не співпадає з залежністю $\sigma(\omega)$ для фулеренів C_{60} , легованих лужними металами [19-20]. В останньому випадку внаслідок переносу зарядів від металічних домішок до молекул з'являється смуга нижче краю енергетичної зони, а оптичне поглинання в області міжзонних переходів не зміниться. Таким чином, можна зробити висновок про відсутність гібридизації станів фулеренів і атомів.

При легуванні киснем додаткові домішкові рівні в області енергетичної щільності не спостерігаються. Відсутня також гібридизація станів в енергетичній області вище щільності. У той же час електронна концентрація при рості концентрації кисню на початковій стадії відпалу зростає. Оскільки на цій стадії кисень, в основному, накопичується на молекулах C_{60} [21], утворюючи з ними хімічні зв'язки, то можна припустити, що при цьому кисень, відіграючи роль акцептора, менше поглинає електрони з фулеренів. Тривалий відпал (473K на протязі 300 хвилин) приводить до того, що кисень у більшій мірі знаходиться у положеннях інтеркаляції, що сприяє переносу зарядів до атомів домішки. Густина станів поблизу молекулярних енергетичних рівнів зменшується, а самі рівні розширюються. Іншими словами, електронна структура мало відповідає молекулярним кристалам при слабкій Ван дер Ваальсовій взаємодії. Можна припустити, що у цьому випадку виникає додаткова кулонівська взаємодія за рахунок просторово рознесених зарядів.

При легуванні атомами міді уже у вихідному стані, рис. 1(б) спектр $\sigma(\omega)$ мало нагадує залежність оптичної провідності для твердих C_{60} . основною відмінністю є поява біля краю енергетичної щільності смуги поглинання в області енергії біля 2 еВ. При меншій концентрації атомів міді спостерігається ще одна смуга біля енергії 1,75 еВ [16-18], що відсутня для фулеренів, легуваних киснем. Повна перебудова спектру $\sigma(\omega)$ відбувається і при більш високих енергіях. З відпалом, при якому концентрація міді в інтеркальованих положеннях зростає, електронна концентрація низькоенергетичного піка збільшується, а величина $\sigma(\omega)$ поблизу енергії 4,5 еВ падає. З подальшим збільшенням концентрації міді (відпал при 473 K) смуги $\sigma(\omega)$ при вказаних енергіях зменшуються. З цього випливає, що на відміну від легування лужними металами, при інтеркалюванні плівок фулеренів атомами міді спостерігається суттєва гібридизація станів. Навряд чи таку гібридизацію можна віднести до фулеренів й інтеркальованих атомів міді. Не виключено, що у досліджуваних плівках $Cu-C_{60}$ значну роль відіграє наявність у них аморфної фази, окислів і кисню. Який з указаних факторів є визначальним, невідомо. Проте можна визначити роль інтеркальованих атомів кисню і міді у трансформації електронної структури кристалічної фази фулеренів C_{60} .

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. T.L. Makarova, Fiz.Tekh.Polupr., 35, 257 (2001).
2. P.C. Eklund, A.M. Rao, Y. Wang et al., Thin Sol. Films, 257, 211 (1995).

3. Э.М. Шпилевский, Diamond Films and Films of Related Material, Kharkov, 242 (2003).
4. Э.М. Шпилевский, Л.В. Баран, Г.П. Окатова и др., Diamond Films and Films of Related Material, Kharkov, 265 (2003).
5. А.С. Вус, А.Н. Стеценко, Diamond Films and Films of Related Material, Kharkov, 270 (2003).
6. П.А. Панчева, А.Л.Тоигтыгин, Diamond Films and Films of Related Material, Kharkov, 210 (2001).
7. Т.Л. Макарова, В.Г. Мелехин, И.Т. Серенков и др., ФТТ, **43**, 1336 (2001).
8. E.A. Katz, D. Faïman, S. Shtutina et al., Physica B, **304**, 348 (2001).
9. V. Lavrentiev, H. Naramoto, H. Abe et al., Fullerenes, Nanotub.and Carbon Nanostr., **12**, 519 (2004).
10. Т.Л. Макарова, И.Б. Захарова, ФТТ, **44**, 478 (2002).
11. R.A. Assink, J.E. Schirber, D.A. Loy et al., J. Mater. Res., **7**, 2136 (1992).
12. P.C. Eklund, A.M. Rao, P.Zhou et al., Thin Sol. Films, **357**, 185 (1995).
13. H. Habuchi, S. Nitta, D. Hary et al., J. Appl. Phys., **87**, 8580 (2000).
14. О.Р. Дмыtrenko, М.М. Bilyi, V.O. Gubanov et al., Mol. Cryst. Liq. Cryst., **385**, 43 (2002).
15. О.Р. Дмыtrenko, N.P. Kulish, Yu.I. Prylutsky et al., Thin Sol. Films, **459**, 254 (2004).
16. О.П. Дмитренко, Н.П. Кулиш, Т.Д., Н.М. Белый и др., Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, **2**, 571 (2004).
17. О.П. Дмитренко, Н.П. Кулиш, Т.Д., Н.М. Белый и др., Nanosystems, Nanomaterials, Nanotechnologies, **2**, 179 (2004).
18. О.Р. Дмыtrenko, N.P. Kulish, E.M. Shpilevskiy et al., Functional Mater., **10**, 521 (2003).
19. Y.-N. Xu, M.-Z. Huang, W.Y. Ching, Phys. Rev. B, **44**, 13171 (1991).

20. Y. Wang, J.M. Holden, A.M. Rao et al., Phys. Rev. B, **45**, 14396 (1992).
21. O.P. Dmytrenko, M.M. Bilyi, I/N/ Dmytruk et al., Fullerenes, Nanotub/ and Carbon Nanostr., **12**, 317 (2004).

Надійшла до редколегії 20.04.06

УДК 533.9

Загородній* А.Г., професор,
Момот А.І., аспірант.

Екранування зарядженої порошинки у плазмі, модель точкового стоку.

Запропоновано модель точкового стоку для опису поглинання порошиною електронів та іонів. На основі цієї моделі, у лінійному наближенні знайдено аналітичні вирази для електростатичного потенціалу та концентрації плазмових частинок біля порошинки. Розглянуто два граничних випадки: слабоіонізована плазма (з урахуванням процесів об'ємної іонізації та рекомбінації) і плазма без зіткнень, що описуються у рамках дрейфово-дифузійного наближення і наближення обмежених орбіт відповідно.

Ключові слова: запорошена плазма, екранування порошинки, слабоіонізована плазма.

A.G. Zagorodny*, professor,
A.I. Momot, post-graduate student.

Screening of charged grain in plasma, model of point-like sink.

The model of point-like sink is proposed for describing the electron and ion absorption by grain in dusty plasma. Analytical expressions for electrostatic potential and plasma particle density near the grain are calculated in the linear approximation within the framework of this model. Two limiting cases of weakly-ionized (with bulk ionization and recombination) and collisionless plasmas, which are described by drift-diffusion and orbit motion limited approaches are considered.

Key Words: dusty plasma, grain screening, weakly-ionized plasma.

*E-mail: azagorodny@bitp.kiev.ua; momot@univ.kiev.ua

Вступ

Якщо у плазму потрапляють твердотільні дрібні частинки (провідник чи діелектрик), то за рахунок поглинання електронів та іонів ці частинки швидко набувають електричного заряду. Так як рухливість електронів значно більша за рухливість іонів то цей заряд буде від'ємним. Плазма з такими домішками називається запорошеною плазмою, причому присутність порошинок у низькотемпературній плазмі скоріше є правилом, ніж виключенням.

Вивчення екранування порошинки, що заряджається плазмовими струмами є важливою задачею фізики запорошеної плазми. Саме характер екранування визначає взаємодію між порошинками, динамічне тертя порошинки, що рухається, рівноважні розподіли порошинок та інше. Рівняння для опису динаміки плазми при заряджанні порошинки є нелінійними, тому існуючі розв'язки задачі екранування є або результатом числового моделювання або отримані у лінійному наближенні, яке справедливе за умови, що пов'язане з наявністю порошинки відхилення концентрації плазмових частинок від рівноважного значення є малим.

Поглинання плазмових частинок порошинкою зазвичай описують, покладаючи концентрації електронів та іонів на поверхні порошинки рівними нулю. У лінійному наближенні використання такої граничної умов є суперечливим. У даній роботі запропоновано модель точкового стоку, яка дозволяє описати процес поглинання плазмових частинок сферичною порошинкою не використовуючи граничні умови. Показано, що цю модель можна застосувати як для плазми з гідродинамічним режимом динаміки плазмових частинок так і для плазми без зіткнень. Запропонована модель також може виявитись корисною для опису плазми з додатковими ускладнюючими деталями такими як не стаціонарність розподілів, наявність границь тощо.

Екранування порошинки у слабоіонізованій плазмі.

Розглянемо слабоіонізовану плазму, в якій іонізація відбувається завдяки зовнішнім джерелам (наприклад, пучком швидких електронів чи протонів у несамостійному розряді або лазерним промінням у фоторезонансній плазмі), а іонізацією власними електронами плазми можна знехтувати. Процес іонізації вважаємо однорідним і стаціонарним. Будемо враховувати також електрон-іонну рекомбінацію. У слабоіонізованій плазмі зіткнення плазмових частинок з нейтральною компонентою відбуваються набагато частіше ніж між електронами та іонами, отже для опису такої системи можна використовувати дрейфодифузійне наближення. У такому випадку рівняння неперервності для плазмових частинок має вигляд

$$\nabla \tilde{\Gamma}_{\sigma} = I - \beta n_e n_i - S_{\sigma} \delta(\vec{r}). \quad (1)$$

Тут індексом σ позначено сорт плазмових частинок $\sigma = e$ – електрон, $\sigma = i$ – іон, I – інтенсивність об'ємної іонізації плазми зовнішніми джерелами, β – коефіцієнт електрон-іонної рекомбінації. Останній доданок у (1) описує зникнення плазмових частинок завдяки наявності точкового стоку, S_{σ} – інтенсивність стоку.

$$\tilde{\Gamma}_{\sigma} = -\frac{e_{\sigma} n_{\sigma}}{m_{\sigma} \nu_{\sigma}} \nabla \phi - D_{\sigma} \nabla n_{\sigma}, \quad (2)$$

де e_{σ} – заряд плазмової частинки, m_{σ} – її маса, ν_{σ} – частота зіткнень з нейтральною компонентою, $n_{\sigma}(\vec{r})$ – концентрація, $\phi(\vec{r})$ – самоузгоджений електростатичний потенціал, D_{σ} – коефіцієнт дифузії. Вважаємо, що коефіцієнти ν_{σ} і D_{σ} не залежать від координат і для коефіцієнта дифузії справедливе співвідношення Ейнштейна $D_{\sigma} = T_{\sigma} / (m_{\sigma} \nu_{\sigma})$, де T_{σ}

температура в енергетичних одиницях. Для слабоіонізованої плазми можна покласти $e_i = e$, $e_e = -e$, де e – елементарний заряд.

Рівняння Пуассона має вигляд

$$\Delta\phi = -4\pi \sum_{\sigma=e,i} e_{\sigma} n_{\sigma} - 4\pi q \delta(\vec{r}). \quad (3)$$

У стаціонарному стані заряд порошинки q не змінюється, значить потоки електронів та іонів рівні $S_i = S_e = S$. Заряд порошинки та інтенсивність стоку не є незалежними величинами, вони не визначаються у рамках даного підходу і ми вважаємо їх заданими.

Після підстановки (2) в (1) і лінеаризації, рівняння (1) и (3) набувають вигляду

$$D_{\sigma} \frac{e_{\sigma} n_0}{T_{\sigma}} \Delta\phi + D_{\sigma} \Delta\delta n_{\sigma} = \beta n_0 (\delta n_i + \delta n_e) + S \delta(\vec{r}), \quad (4)$$

$$\Delta\phi = -4\pi e (\delta n_i - \delta n_e) - 4\pi q \delta(\vec{r}), \quad (5)$$

де $\delta n_{\sigma}(\vec{r}) = n_{\sigma}(\vec{r}) - n_0$ – збурення концентрації плазмових частинок, пов'язане з присутністю порошинки. За відсутності порошинки іонізація компенсується рекомбінацією $I - \beta n_0^2 = 0$ і $n_0 = \sqrt{I/\beta}$.

У $\vec{k}$ -представленні рівняння (4) и (5) мають вигляд

$$\frac{e_{\sigma} n_0}{T_{\sigma}} k^2 \phi_{\vec{k}} + k^2 \delta n_{\sigma \vec{k}} = -k_{\sigma\sigma}^2 (\delta n_{i\vec{k}} + \delta n_{e\vec{k}}) - \tilde{S}_{\sigma}/e, \quad (6)$$

$$k^2 \phi_{\vec{k}} = 4\pi e (\delta n_{i\vec{k}} - \delta n_{e\vec{k}}) + 4\pi q, \quad (7)$$

де $k_{\sigma\sigma}^2 = \beta n_0 / D_{\sigma}$, $\tilde{S}_{\sigma} = eS / D_{\sigma}$.

Підстановка (7) у (6) дає систему двох рівнянь відносно $\delta n_{i\vec{k}}, \delta n_{e\vec{k}}$, що мають розв'язки

$$\delta n_{i\vec{k}} = \frac{1}{e\Delta} (-k^2 (\tilde{S}_i + k_{Di}^2 q) - q k_0^4 - \tilde{S}_i k_{De}^2 - \tilde{S}_e k_{Di}^2), \quad (8)$$

$$\delta n_{e\vec{k}} = \frac{1}{e\Delta} (-k^2 (\tilde{S}_e - k_{De}^2 q) + q k_0^4 - \tilde{S}_i k_{De}^2 - \tilde{S}_e k_{Di}^2), \quad (9)$$

де

$$\Delta = k^4 + k^2 (k_D^2 + k_s^2) + 2k_0^4, \quad (10)$$

$k_s^2 = k_{si}^2 + k_{se}^2$, $k_D^2 = k_{Di}^2 + k_{De}^2$, $k_{D\sigma}^2 = 4\pi e_\sigma^2 n_0 / T_\sigma$, $k_0^4 = k_{se}^2 k_{Di}^2 + k_{si}^2 k_{De}^2$, $k_D = 1/r_D$,
 r_D – радіус Дебая.

Підставляючи (8) і (9) в (7) знаходимо Фур'є образ потенціалу

$$\phi_k = \frac{4\pi}{k^2 \Delta} \left(-2qk_0^4 - k^2(qk_D^2 + \tilde{S}_i - \tilde{S}_e) \right) + \frac{4\pi q}{k^2}. \quad (11)$$

Як видно потенціал складається з власного потенціалу точкової порошинки і індукованої частини, що зумовлена відгуком системи як на електричне поле порошинки так і наявністю стоків.

Введемо позначення $\tilde{S} = eS(D_i^{-1} - D_e^{-1})/k_D^2$, $\tilde{S}$ має розмірність заряду. Неважко показати, що (11) можна представити у вигляді

$$\phi_k = \frac{4\pi A_1}{k^2 + k_1^2} - \frac{4\pi A_2}{k^2 + k_2^2}, \quad (12)$$

де

$$A_{1,2} = \frac{q(k_{1,2}^2 - k_s^2) + k_D^2 \tilde{S}}{k_1^2 - k_2^2}, \quad (13)$$

$$k_{1,2}^2 = \frac{1}{2} \left(k_D^2 + k_s^2 \pm \sqrt{(k_D^2 + k_s^2)^2 - 8k_0^4} \right). \quad (14)$$

Очевидно

$$\phi(r) = A_1 \frac{e^{-k_1 r}}{r} - A_2 \frac{e^{-k_2 r}}{r}. \quad (15)$$

Отже у нашому випадку потенціал, що створює порошинка складається з двох екранованих доданків з різними довжинами екранування, які можуть суттєво відрізнятися від дебаївської. Такі ж вирази для обернених довжин k_1, k_2 були отримані в роботі [1]. На великих відстанях екранування буде визначатися меншою сталою екранування, а саме, сталою зі знаком мінус в (14). Збільшення радіусу екранування підтверджується чисельними розрахунками в роботі [2].

Якщо у системі відсутні зовнішні джерел іонізації та рекомбінація, то $k_1 = k_D$, $k_2 = 0$ і вираз для потенціалу спрощується

$$\phi_k = \frac{4\pi(q + \tilde{S})}{k^2 + k_D^2} - \frac{4\pi \tilde{S}}{k^2}, \quad (16)$$

або

$$\phi(r) = (q + \tilde{S}) \frac{e^{-k_D r}}{r} - \frac{\tilde{S}}{r}. \quad (17)$$

Тепер потенціал є суперпозицією дебаївського і кулонівського потенціалів з ефективними зарядами. Цей результат відповідає отриманому у роботі [3], де враховувався скінченний розмір порошинки. Як видно з (17) $\tilde{S}$ можна трактувати як ефективний заряд у неекранованій частині потенціалу. Ця величина може бути пов'язана з зарядом порошинки наступним чином $\tilde{S} = \alpha q$, де коефіцієнт пропорційності α , можна взяти з чисельних розрахунків (наприклад з роботи [2], в якій показано, що значення α залежить від радіусу порошинки, і змінюється у межах від $\alpha \ll 1$ для великих порошинок і прямує до значення 0.5, коли радіус порошинки прямує до нуля).

Екранування порошинки у плазмі без зіткнень

Спробуємо застосувати модель точкового стоку для плазми у якій зіткненнями між електронами, іонами та нейтралами можна знехтувати і враховувати лише зіткнення плазмових частинок з порошинкою. Тоді динаміку плазми слід описувати рівнянням Власова, яке у стаціонарному випадку має вигляд

$$\left(\bar{v} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} - \frac{e_\sigma}{m_\sigma} \nabla \phi(\bar{r}) \frac{\partial}{\partial \bar{v}} \right) f_\sigma(\bar{r}, \bar{v}) = -\delta(\bar{r}) \sigma_\sigma(v) v f_\sigma(\bar{r}, \bar{v}), \quad (18)$$

Права частина рівняння моделює поглинання плазмових частинок точковим стоком, де $\sigma_\sigma(v)$ – переріз поглинання плазмових частинок порошинкою скінченного розміру. За відсутності стоку функція розподілу електронів та іонів максвелівська $f_{0\sigma}(v)$. Нехай збурення функції розподілу через наявність порошинки $\delta f_\sigma(\bar{r}, \bar{v}) = f_\sigma(\bar{r}, \bar{v}) - f_{0\sigma}(v)$ є малим.

Лінеаризуючи рівняння (18) отримуємо

$$\bar{v} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \delta f_\sigma(\bar{r}, \bar{v}) - \frac{e_\sigma}{m_\sigma} \nabla \phi(\bar{r}) \frac{\partial}{\partial \bar{v}} f_{0\sigma}(v) = -\delta(\bar{r}) \sigma_\sigma(v) v f_{0\sigma}(v). \quad (19)$$

У $\bar{k}$ -представленні рівняння (19) має вигляд

$$i\bar{k}\bar{v}\delta f_{\sigma\bar{k}}(\bar{v}) + i\bar{k}\bar{v} \frac{e_\sigma}{T_\sigma} \phi_{\bar{k}} f_{0\sigma}(v) = -\sigma_\sigma(v) v f_{0\sigma}(v), \quad (20)$$

звідки

$$\delta f_{\sigma\vec{k}}(\vec{v}) = -\frac{e_{\sigma}}{T_{\sigma}}\phi_{\vec{k}}f_{0\sigma}(v) + \frac{i\sigma_{\sigma}(v)v f_{0\sigma}(v)}{\vec{k}\vec{v} - i0}. \quad (21)$$

Тут уявна частина знаменника визначає правило обходу повної особливості при інтегруванні (21) по швидкості (правило обходу Ландау).

Збурення густини заряду пов'язане зі збуренням функції розподілу наступним чином

$$\delta\rho_{\sigma\vec{k}} = e_{\sigma}n_{\sigma} \int \delta f_{\sigma\vec{k}}(\vec{v}) d\vec{v}. \quad (22)$$

Підстановка (21) у (22) дає

$$\delta\rho_{\sigma\vec{k}} = -\frac{e_{\sigma}^2 n_{\sigma}}{T_{\sigma}}\phi_{\vec{k}} - e_{\sigma}n_{\sigma} \frac{2\pi^2}{k} \int v^2 \sigma_{\sigma}(v) f_{0\sigma}(v) dv \quad (23)$$

і рівняння Пуассона набуває вигляду

$$\Delta\phi(\vec{r}) = -4\pi \sum_{\sigma=e,i} \delta\rho_{\sigma}(\vec{r}) - 4\pi q\delta(\vec{r}), \quad (24)$$

де заряд q знаходиться з умови рівності струмів через поверхню порошинки. У $\vec{k}$ -представленні відповідно маємо

$$k^2\phi_{\vec{k}} = 4\pi \sum_{\sigma=e,i} \delta\rho_{\sigma\vec{k}} + 4\pi q, \quad (25)$$

що після підстановки (23) у (25) дає

$$\phi_{\vec{k}} = \frac{4\pi q}{k^2 + k_D^2} - \frac{8\pi^3(A_i + A_e)}{k(k^2 + k_D^2)}, \quad (26)$$

де

$$A_{\sigma} = e_{\sigma}n_{\sigma} \int v^2 \sigma_{\sigma}(v) f_{0\sigma}(v) dv,$$

В координатному представленні

$$\phi(r) = \frac{q}{r} e^{-k_D r} - \frac{2\pi(A_i + A_e)}{rk_D} \left(e^{-k_D r} \text{Ei}(k_D r) - e^{k_D r} \text{Ei}(-k_D r) \right), \quad (27)$$

де $\text{Ei}(x) = \int_{-\infty}^x t^{-1} e^t dt$ - інтегральна експонента.

При $x \gg 1$, $\text{Ei}(x) \approx \frac{e^x}{x} \left(1 + \frac{1}{x} + \frac{2!}{x^2} + \dots \right)$

Отже при $rk_D \gg 1$

$$\phi(r) \approx -\frac{4\pi(A_i + A_e)}{(rk_D)^2}. \quad (28)$$

Використовуючи відомі з теорії обмежених орбіт формули для перерізу поглинання і заряду порошинки можна показати, що (28) зводиться до вигляду

$$\phi(r) \approx -\frac{\pi a^2 e_i n_i}{(rk_D)^2} \left(1 + \frac{2Z_i Z_g e_e^2}{aT_i} \right), \quad (29)$$

що збігається з результатом отриманим в [4].

Висновки

Використовуючи модель точкових стоків отримано асимптотичні вирази для концентрації плазмових частинок та потенціалу порошинки, що заряджається потоками електронів та іонів. Показано можливість використання запропонованої моделі для різних способів опису плазми. У випадку слабоіонізованої плазми, шляхом порівняння отриманих аналітичних виразів з результатами числового моделювання знайдено простий зв'язок між значенням заряду порошинки та інтенсивності стоку.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Филиппов А.В., Загородний А.Г., Паль А.Ф., Старостин А.Н. Экранировка заряда микрочастицы в плазме с внешним источником ионизации // Письма в ЖЭТФ. – 2005. – Т.81, №4. – С. 180-185.
2. Bystrenko O., Zagorodny A.G. Screening of dust grains in a weakly ionized gas: Effects of charging by plasma currents // Phys. Rev. E. 67, 2003, 066403.
3. Загородній А.Г., Момот А.І. Далекодійні ефективні потенціали взаємодії порошинки у плазмі // УФЖ – 2006 – Т.51, №6. – С. 570-574.
4. Tsytovich V.N., Khodataev Yu.K., Bingham R. // Comments Plasma Phys. Controlled Fusion 17, 1996, p. 249.

Надійшла до редколегії 11.05.2006

УДК 537.32

Захаренко М.І.
Копань В.С.,
Копань Ю.В.,
Хуторянська Н.В.

**Вплив магнітного поля і
механічних напруг на термо-
е.р.с. аморфного сплаву
 $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$**

Доведено, що термо-електрорушійна сила аморфного сплаву $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ лінійно зростає з деформацією: $E_p = -3 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_p$ мкВ/К (при розтягові) та $E_c = 4 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_c$ мкВ/К (при стисканні), де $\sigma_p < 50$ МПа та σ_c - напруги розтягу і одноосного стискання, відповідно. Під дією магнітного поля $H = 5$ кЕ термо-е.р.с. зростає на $\Delta E = 0.070 \pm 0.005$ мкВ/К, причому величина ΔE не залежить від ступеня кристалізації сплаву.

Ключові слова: термо-е.р.с., аморфний сплав, термомагнітний ефект, магнітострикція.

M. Zakharenko
V. Kopan,
U. Kopan
N. Hutoryanska,

**The influence of magnetic field and
mechanical stress on
thermoelectric power of
 $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ amorphous alloy**

Thermopower of $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ amorphous alloy was shown to vary linearly with deformation: $E_p = -3 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_p$ $\mu\text{V/K}$, where $\sigma_p < 50$ MPa is the tensile stress, and by $E_c = 4 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_c$ $\mu\text{V/K}$ under the uniaxial compression. Thermopower rises by $\Delta E = 0.07 \pm 0.005$ $\mu\text{V/K}$. Under the action of magnetic field of $H = 5$ kE ΔE was shown to be independent on the extent of AMA crystallization.

Key Words: thermoelectric power, amorphous alloy, termomagnetic effect, magnetostriction

*E-mail: kopa@pulsary.com.ua

Аморфні металічні сплави (АМС) на основі системи Fe-Si-B є магнітом'якими сплавами з високими і навіть рекордними експлуатаційними характеристиками [1], що і зумовило їх досить широке використання для створення магнітопроводів в елементах та вузлах електронної техніки [2]. Разом з тим, внаслідок того, що АМС за своєю природою є метастабільними системами, їх службові характеристики можуть змінюватися з часом завдяки процесам структурної релаксації та кристалізації, що накладає суттєві обмеження на умови технічного застосування цих сплавів [3]. Ці процеси можуть посилюватися за умов дії різноманітних зовнішніх чинників (механічні напруження, дія підвищеної температури та градієнтів температури тощо).

Метою даної роботи було встановити, як впливає термообробка АМС $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ при одночасній дії магнітних напружень та магнітного поля на таку структурно чутливу характеристику, як термо-е.р.с. E .

В роботі [4] було доведено, що пластична деформація одної вітки термопари не впливає на величину термомагнітного ефекту (ТМЕ). Суть цього ефекту, відкритого у 1891 р. [5], полягає в тому, що внаслідок накладання на феромагнітну вітку термопари поздовжнього або поперечного магнітного поля виникає додаткова термо-е.р.с. ΔE . Якщо d-електрони феромагнетиків беруть участь в утворенні міжатомних зв'язків, то зі збільшенням деформації ΔE повинна зростати. У роботі [4] було показано, що в поперечному магнітному полі ΔE нікелю не залежить від деформації, що може вказувати на те, що деформація практично не впливає на енергетичний спектр d-електронів. Це фактично означає, що d-електрони дають малий внесок в енергію міжатомного зв'язку. Аморфні сплави в цьому плані цікаві тим, що в них максимальні спотворення порядку укладки атомів, які не досягаються деформацією. Тому можна простежити, як змінюється ΔE при наростанні упорядкування атомів при кристалізації.

Методика вимірювань та приготування зразків.

Аморфні сплави номінального складу $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ були виготовлені у формі стрічок шириною 10 мм і товщиною 33 мкм методом спінінгування розплаву. Автори висловлюють вдячність В.К. Носенку (ІМФ НАН України) за надані нам зразки для досліджень.

Термомагнітний ефект вивчався на установці [4] з похибкою 10^{-2} мкВ при вимірюванні термо-е.р.с. в полі напруженістю 5 кЕ. Гарячий спай термопари мав температуру 640°C , холодний був при 20°C . Термо-е.р.с. досліджуваного АМС відносно свинцю становила $E = -0,59$ мкВ/К.

Експериментальні результати та їх обговорення.

На рис. 1 наведені залежності E від температури та часу t відпалу для термопари, обидві вітки якої були виготовлені зі сплавом $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$.

Термо-е.р.с. E вимірювали, відпаливши в окремій печі одну з віток при певній температурі, величина якої зазначена цифрою біля кожної точки рис. 1. Наприклад, відпаливши вітку при 390°C протягом 6 хвилин, складали термопару і вимірювали E . Потім, ту ж вітку знову відпалювали 6 хвилин при 400°C і знову визначали E , і т. д.

З рис. 1 видно, що відпал досліджуваного АМС при достатньо низьких температурах не супроводжується зміною термо-е.р.с. Починаючи з 390°C термо-е.р.с. суттєво зростає, що пов'язане зі структурними змінами у відпаленій вітці термопари, а саме – з процесами кристалізації АМС. Зростання E відбувається аж до $440\text{--}450^\circ\text{C}$. Це добре узгоджується з результатами роботи [6], згідно з якими кристалізація досліджуваного

АМС починається при 374°C і відбувається у досить широкому температурному інтервалі.

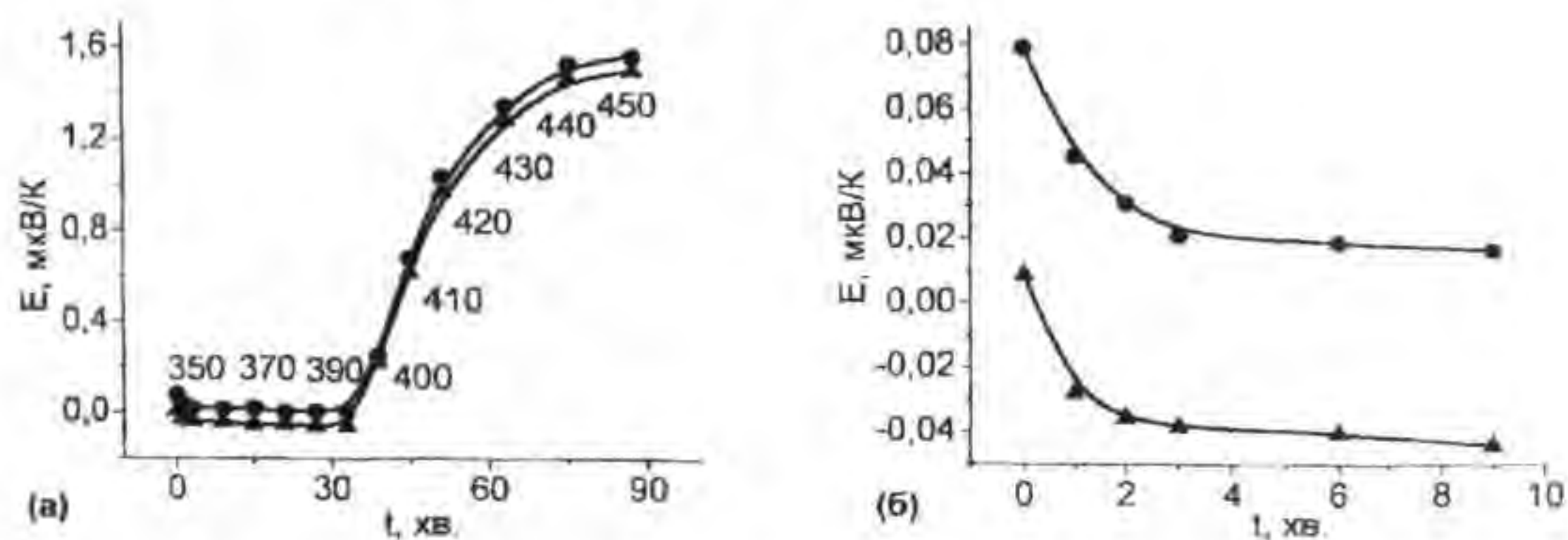


Рис.1. Залежність термо-е.р.с. E від температури та часу t відпалу (а) та від t при 350°C (б). ● - вимірювання E , проведені у зовнішньому магнітному полі $H=5 \text{ кЕ}$, ▲ - за відсутності зовнішнього поля.

При ізотермічному відпалі при температурі 350°C спостерігається зменшення E (рис.1, б) зі зростанням тривалості відпалу t . Крім того, аналіз наведених на рис.1 кривих вказує на те, що приріст термо-е.р.с., обумовлений накладанням магнітного поля на вітку термопари (після її чергового відпалу) не залежить від ступеня кристалізації і становить $\Delta E = 0,070 \pm 0,005 \text{ мкВ/К}$.

Вплив деформацій на термо-е.р.с. АМС $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ вивчали за такою схемою. Одну вітку термопари, що була приєднана до клем установки в горизонтальному положенні, навантажували посередині силою F так, що вона прогиналась, приймаючи форму сторін трикутника з тупим кутом при вершині. Напругу σ , що розтягувала вітку термопари, визначали за формулою:

$$\sigma = \frac{Fl}{4\lambda ab}, \quad (1)$$

де l , a , b – довжина, ширина і товщина вітки термопари, λ – стріла прогину (висота тупокутного трикутника). В нашому випадку $l=87 \text{ мм}$, $a=10 \text{ мм}$, $b=33 \text{ мкм}$. Розтягнувши вітку термопари до певної напруги σ , вимірювали E . Одержані результати проілюстровані рис. 2. Видно, що термо-е.р.с., наведена пружною деформацією однієї з віток термопари, зростає в від'ємну сторону і досягає насичення $E_p = (30 \pm 5) \cdot 10^{-3} \text{ мкВ/К}$ при $\sigma_p \geq 200 \text{ МПа}$.

Була досліджена також зміна термо-е.р.с. при одноосному стисканні вітки термопари. Для цього половину вітки термопари згортали вздовж поздовжньої осі в напівциліндр діаметром $\sim 4 \text{ мм}$, накручували на нього спірально кевларову високоміцну (межа міцності $200\text{-}250 \text{ кГс/мм}^2$) нитку. При довжині напівциліндра до 10 мм він не втрачав стійкості при

накладанні стискаючої напруги $\sigma < 80$ МПа. Схема пристрою для одноосного стискання з одночасним вимірюванням термо-е.р.с. міститься в роботі [7].

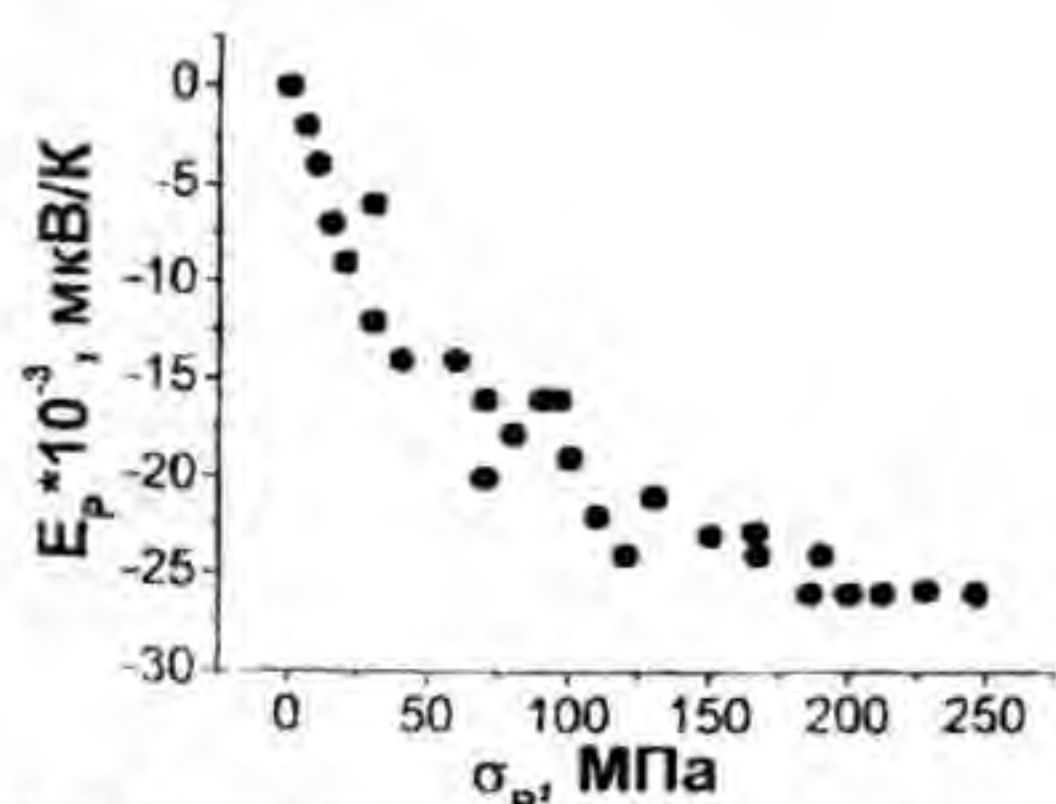


Рис.2. Зміна термо-е.р.с. E_p при пружному розтягуванні одної вітки термопари напругою σ_p .

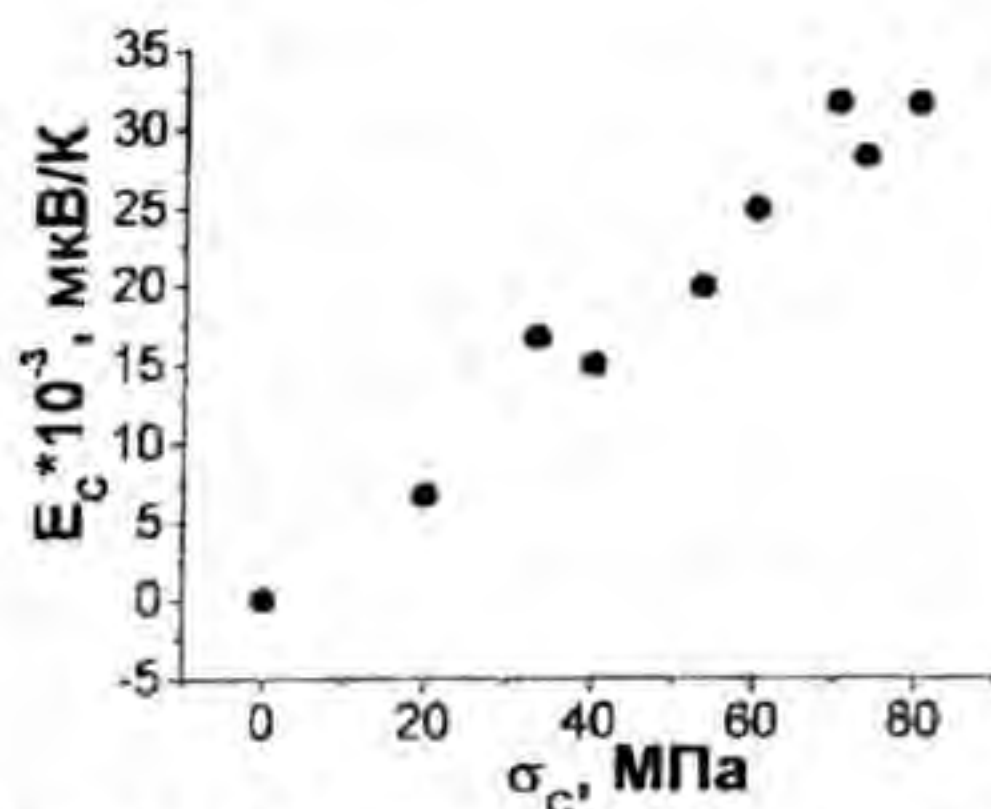


Рис.3. Зміна термо-е.р.с. E_c при пружному одноосному стисканні одної вітки термопари напругою σ_c .

Аналізуючи наведені на рис. 2 і 3 дані, можна стверджувати наступне. При механічній деформації однієї з віток термопари спостерігається зростання E за абсолютною величиною. Знак зумовленої деформацією зміни термо-е.р.с. залежить від виду прикладеного механічного навантаження. При розтягові вітки термопари термо-е.р.с. зростає у від'ємну сторону, при стисканні – у додатню. Аналогічна інверсія знаку E при інверсії напруг спостерігалась нами раніше в нікелю [4], міді і алюмінію [7]. Крім того, величини термо-е.р.с. при $|\sigma| \leq 50$ МПа (в пружній області) становлять $E_p = -14 \cdot 10^{-3}$ мкВ/К та $E_c = 20 \cdot 10^{-3}$ мкВ/К при розтягуванні і стисканні, відповідно. Швидкість зміни $dE_p/d\sigma_p \approx 3 \cdot 10^{-10}$ мкВ/К*Па та $dE_c/d\sigma_c \approx 4 \cdot 10^{-10}$ мкВ/К*Па.

Отже, одноосне стискання ефективніше змінює термо-е.р.с., ніж розтягування. Це можна пов'язувати з асиметрією залежності потенціалу міжатомної взаємодії від міжатомної відстані. Наприклад, для бездефектного кристалу NaCl сила міжатомної взаємодії вздовж напрямку [111] змінюється з відстанню r між атомами, як

$$F = \frac{B}{r^9} - \frac{A}{r^2}, \quad (2)$$

де B і A – константи.

Щось схоже спостерігається і в металевих сплавах. Саме тому деформації стискання ефективніше змінюють фізичні властивості твердого тіла, ніж деформації розтягування.

На думку авторів [8], в металах зв'язок між атомами забезпечують, головним чином, SP-електрони. При зміні відстані між атомами змінюється перекриття відповідних орбіталей: воно зростає при стисканні

зразка і зменшується при його розтягуванні. Внаслідок цього змінюється рухливість електронів провідності та їх фононний спектр. Оскільки термо-е.р.с. обумовлена дифузією електронів провідності під дією градієнту температури та їх фононним захопленням, то при інверсії напруг повинна відбуватись і зміна знаку термо-е.р.с.

Відомо, що в аморфних стрічках є залишкові напруги, які є наслідком гартування розплаву з різними швидкостями на вільній і контактній поверхнях стрічки (так звані гартувальні напруги) та наявності в об'ємі стрічки певної частки кристалічної фази. Стрічки були плоскими до термообробки і не змінювали форми після відпалів та після травлення на 50% по товщині у розчині $\text{HCl} + \text{HNO}_3 + \text{HF}$. Це означає, що стискаючі σ_c і розтягуючі σ_p напруги в них взаємно скомпенсовані, тобто $|\sigma_c| = |\sigma_p|$,

$$\int_{\tau} \sigma_c(x, y, z) d\tau = \int_{\tau} \sigma_p(x, y, z) d\tau, \quad (3)$$

де $d\tau$ - елемент об'єму стрічки.

На рис. 2 і 3 видно, що в пружній області ($\sigma < 5 \cdot 10^7 \text{ Па}$)

$$E_p(x, y, z) = \frac{dE}{d\sigma_p} \sigma_p(x, y, z), \quad (4)$$

$$E_c(x, y, z) = \frac{dE}{d\sigma_c} \sigma_c(x, y, z). \quad (5)$$

Сумарна термо-е.р.с. $E = E_p + E_c$. Вона генерується елементарними об'ємами $d\tau$ зразка.

$$E = \int_{\tau} E_p(x, y, z) d\tau + \int_{\tau} E_c(x, y, z) d\tau. \quad (6)$$

Одержимо:

$$E = -3 \cdot 10^{-10} \int_{\tau} \sigma_p(x, y, z) d\tau + 4 \cdot 10^{-10} \int_{\tau} \sigma_c(x, y, z) d\tau, \quad (7)$$

Врахувавши (3), знайдемо:

$$E = 10^{-10} \int_{\tau} \sigma_c(x, y, z) d\tau. \quad (8)$$

З (8) випливає, що $E > 0$. При низькотемпературному відпалі $E < 0$ (рис.1б). Це означає, що релаксують додатні напруги, беруть гору від'ємні. Зразок при цьому не коробиться, що свідчить про симетричність розподілу напруг в об'ємі. Велике зростання E при кристалізації (рис.1а) вказує на те, що генерація E на цьому етапі здійснюється не за рахунок напруг.

Як бачимо, термо-е.р.с. E_p і E_c індукуються в аморфному сплаві пружними напругами, а ΔE – магнітним полем. Виникає запитання, чи немає зв'язку між цими явищами, адже магнітне поле може

супроводжуватись магнітострикцією і, відповідно, створювати додаткові пружні напруги в об'ємі стрічки. Нам невідомі літературні джерела, в яких би повідомлялось, про поперечну магнітострикцію в досліджуваному сшаві, тому ми її вивчали самостійно.

Правий кінець стрічки 1 довжиною 40 мм (рис.4) приклеювали в щілині, утвореній скляною пластиною 2 і алюмінієвим брусом 3. Утворена таким чином щілина обмежувала поперечне переміщення стрічки при накладанні магнітного поля.

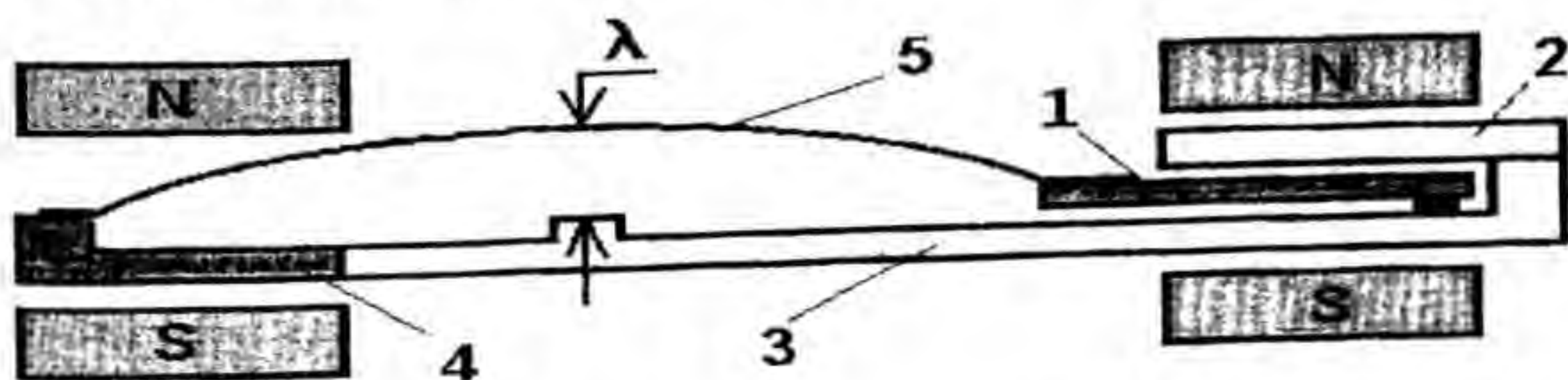


Рис.4.Схема пристрою для вимірювання поперечної магнітострикції стрічки 1 з використанням нікелевого еталону 4.

До лівого кінця бруса 3 був прикріплений жорсткий нікелевий еталон 4. До лівого кінця стрічки 1 і лівого кінця еталону 4 приклеювали алюмінієву фольгу 5, стрілу прогину λ якої вимірювали мікроскопом з ціною поділки 1 мкм.

Магнітострикцію визначали з рівняння:

$$\frac{\Delta l}{l} = \frac{2}{3Ll}(\lambda_1^2 - \lambda_2^2), \quad (9)$$

де L і l – довжини фольги 5 і стрічки 1, відповідно;

λ_1 і λ_2 – стріли прогину фольги 5, коли магнітне поле $H=0$ та H , відповідно.

Рівняння (9) являє собою переписану для умов нашого експерименту формулу ланцюгової лінії, що була неодноразово використана раніше [9] при проведенні дилатометричних вимірювань. При $\lambda_1=0,600$ мм і $\lambda_2=0,601$ мм, $l=25$ мм, $L=120$ мм відносна зміна довжини зразка складала $\Delta l/l \sim 3 \cdot 10^{-7}$.

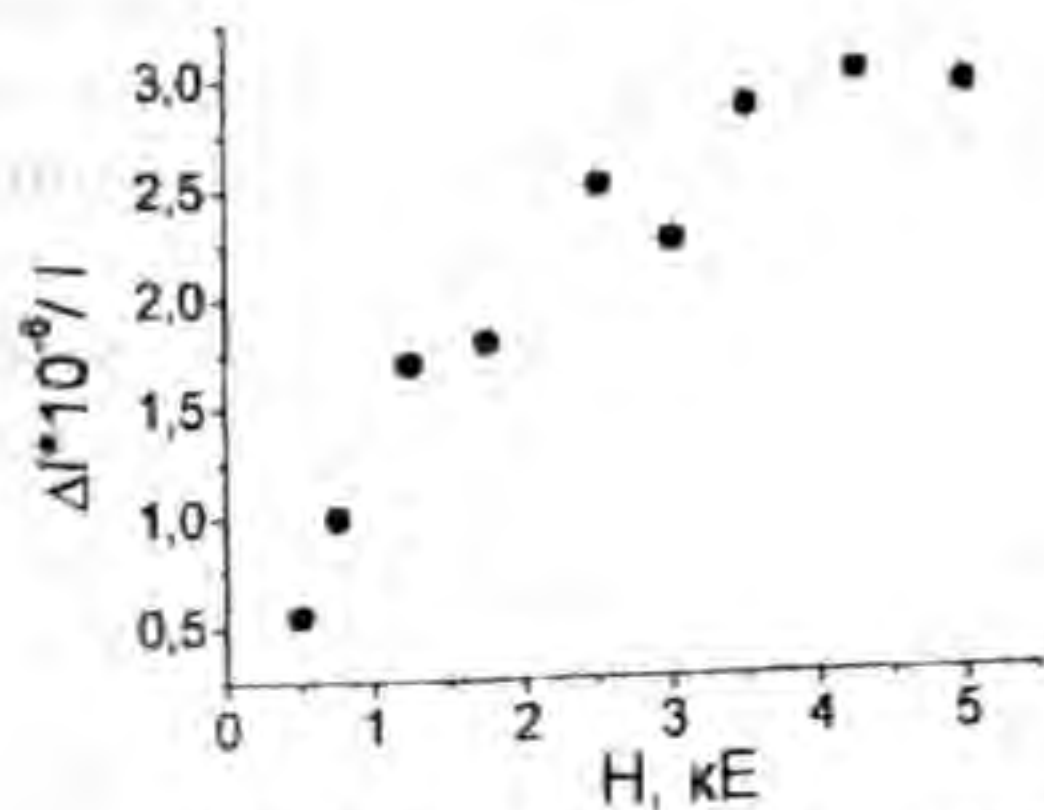


Рис.5. Від'ємна поперечна магнітострикція $\Delta l/l$ аморфних стрічок в полі H .

Пристрій тестували, переміщуючи магніт з крайнього правого положення у крайнє ліве (рис.4) . Тоді λ змінювалась за рахунок деформації нікелевого еталону 4, магнітострикція якого добре вивчена.

Результати вимірювання магнітострикції для АМС $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ наведені на рис. 5. При накладанні поперечного магнітного поля на стрічку вона вкорочується, отже магнітострикція – від’ємна. Напруги стискання σ_c , що виникають внаслідок магнітострикції, малі: $\sigma_c = E_{\text{Ю}} \Delta l / l \approx 15 \cdot 10^{10} \cdot 3 \cdot 10^{-6} = 0,45$ МПа ($E_{\text{Ю}}$ – модуль Юнга). Вони спричиняють появу термомагнітної е.р.с. $\Delta E = E_c = 4 \cdot 10^{-10} \cdot 45 \cdot 10^4 \approx 2 \cdot 10^{-4}$ мкВ/К. В експерименті одержано, що $\Delta E = 0,070 \pm 0,005$ мкВ/К. Отже, лише ефектом магнітострикції не можна пояснити термомагнітний ефект в аморфному матеріалі, що вивчався. Існують якісь інші причини генерування ΔE .

Незалежність ΔE від величини спотворення кристалічної ґратки у нікелю та аморфному сплаві $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ свідчить, що d-електрони відіграють незначну роль в утворенні міжатомних зв’язків. Зміна стану d-електронів магнітним полем опосередковано впливає на рухливість електронів провідності, що й спричинює появу термомагнітного ефекту.

Висновки

1. Напруги стискання в пружній області σ_c одної вітки термопари з $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ спричиняють генерацію термо-е.р.с. $E_c = 4 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_c$ мкВ/К, напруги розтягу σ_p дають $E_p = 3 \cdot 10^{-10} \cdot \sigma_p$ мкВ/К.
2. При накладанні поперечного магнітного поля $H = 5$ кЕ на одну вітку термопари виникає термомагнітна е.р.с. $\Delta E = 0,07 \pm 0,005$ мкВ/К. ΔE не залежить від ступеня кристалізації аморфного сплаву, як незалежить і від ступеня деформації нікелевого зразка [4].
3. При накладанні поперечного магнітного поля $H = 5$ кЕ (в області насичення) спостерігається від’ємна магнітострикція $\Delta l / l = -3 \cdot 10^{-6}$. Напруги магнітострикції можуть викликати ΔE , що в ~ 300 разів менша за експериментальні значення. Тому магнітострикція не є основною причиною термомагнітного ефекту в досліджуваному АМС.
4. Термомагнітний ефект у нікелю та сплаві $\text{Fe}_{75}\text{Ni}_4\text{Mo}_3\text{Si}_2\text{B}_{16}$ може бути спричинений опосередкованим впливом зміни стану d-електронів при намагнічуванні АМС на рухливість електронів провідності.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. M.Zakharenko, O.Brud'ko, M.Babich et al. Thermomagnetic study of the $\text{Fe}_{80}\text{Si}_6\text{B}_{14}$ -based soft magnetic glasses// J. magn. magn. mater, 2000, V.215-216, P.313-315.
2. Nemoshkalenko V.V., Maslov V.V., Nosenko V.K. J. Met. Phys. And Adv. Technol. – 1994. – V. 16. – P.5-9.

3. Судзуки К, Фудзимори Х., Хасимото К. Аморфные металлы // М.: Металлургия. – 1987, 328 с.
4. Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. Вплив магнітного поля і механічних напруг на термо-е.р.с. нікелю. // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2005. - № 1. – С. 332-338.
5. Чечерников В.И. Магнитные измерения. М.: Изд. МГУ. – 1963. – С.146-147.
6. Носенко В.К. Формування аморфних та наноструктурних станів в сплавах на основі Fe і Al. Автореф. докторської дисертації. Київ: ІМФ НАНУ. - 2005. – 41 с.
7. Копань В.С., Хуторянська Н.В., Копань Ю.В. П'єзотермо-е.р.с. міді та алюмінію // Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки. – 2005. - №2. – С.421-427.
8. Кузьменко П.П., Макара В.А. Зв'язок між електронною структурою атомів, кристалічною структурою і магнітними властивостями в металах. К. «Наукова думка». – 1995. – С. 124.
9. Герцрикен С.Д., Новиков Н.Н. Ежегодник Киевского университета, Серия: физика. – 1958.; УФЖ – 1958. – Т.3, №2 – С.275, №6; 1959. – Т.4, №2.

Надійшла до редколегії 17. 01.2006

УДК 532.72

Ковальчук В.І., наук. співр.,
Комарова Л.О., аспір.,
Наконечний Є.П., студ.

Вплив розчинених фуллеренів C_{60} на коефіцієнт самодифузії молекул бензолу

Методом квазіпружного розсіяння повільних нейтронів досліджений вплив фуллеренів C_{60} , розчинених у бензолі, на коефіцієнт самодифузії D молекул бензолу. Встановлено, що після розчинення фуллерену у бензолі величина D зменшується ($\sim 15\%$), в той час, як колективна частина D зростає ($\sim 20\%$) за рахунок групування молекул бензолу навколо C_{60} .

Ключові слова: розсіяння повільних нейтронів, коефіцієнт самодифузії бензолу, фуллерени.

V.I. Kovalchuk, Sci. Res.,
L.O. Komarova, PhD student,
E.P. Nakonechny, student

The influence of soluted fullerenes C_{60} on self-diffusion coefficient of benzol molecules

Using of neutron spectroscopy method, we investigated the influence of fulleren C_{60} on self-diffusion coefficient D of benzol molecules. It has been found that value of D decreases ($\sim 15\%$) for benzol- C_{60} system, while collective part of D increases ($\sim 20\%$) due to grouping of benzol molecules around the C_{60} .

Key words: scattering of slow neutrons, self-diffusion coefficient of benzol molecules, fullerenes.

Одним з найбільш динамічно розвинених напрямків сучасної хімічної фізики є вивчення фуллеренів в розчинах. По-перше, фуллерени характеризуються незвичайними властивостями, які проявляються при різних умовах [1]. По-друге, фуллерени є новим матеріалом, що застосовується в виробництвах, пов'язаних з хімією, фізикою, біологією, медициною. Це надпровідники, нанотрубки, ендосендральні комплекси [2]. Сучасні методи отримання та очистки фуллеренів в макроскопічних масах базуються на технології розчинення. Внаслідок інтенсивного термічного впливу на поверхню кристалічного графіту утворюється сажа, яка вміщує до 12% фуллеренів. Відокремлення фуллеренів від сажі базується на тому, що на відміну від сажі, фуллерени непогано розчиняються в бензолі, толуолі, ксилолі та інших органічних розчинниках [3]. Структура таких розчинів досліджувалася як експериментально, так і теоретично [4,5]. Було показано, що навіть в розведених розчинниках при кімнатній температурі фуллерен C_{60} утворює агрегати - кластери. Так, в толуолі стабільні кластери $(C_{60})_N$ мають розміри порядку 1.2 нм і агрегаційне число $N \geq 3$. Електронні спектри поглинання [5] показують, що при концентрації C_{60} від 0.18 г/л до 0.78 г/л в бензолі кластери $(C_{60})_N$ можуть бути описані як

фрактальні структури з фрактальною розмірністю $d \approx 2.1$, що узгоджується з теоретичними розрахунками [4]. Такі зміни в структурі органічного розчинника при добавленні фуллерену C_{60} зумовлюють особливості кінетичних властивостей розчинника, наприклад, його коефіцієнта самодифузії.

Метою даної роботи було дослідження впливу домішки фуллеренів C_{60} , розчинених в бензолі, на коефіцієнт самодифузії молекул бензолу. Фуллерени екстрагувались бензолом із сажі, синтезованої класичним методом [1], який набув широкого розповсюдження: сажу одержували в процесі електродугового випаровування графітових електродів і подальшої конденсації атомів вуглецю в атмосфері гелію. Дослідження проводилися методом квазіпружного розсіяння повільних нейтронів [6,7] на нейтронному спектрометрі, який розташований на атомному реакторі ВВР-М Інституту ядерних досліджень НАН України. Для експерименту ми використовували 2 зразки: чистий бензол и розчин C_{60} у бензолі з концентрацією 3 мг/л. Час експозиції для кожного із зразків складав 20 год. при температурі 293°K . Спектри розсіяння були проаналізовані в рамках дифузійної моделі Булавіна-Оскотського [7], за якою енергетичне розширення квазіпружного піку визначається як

$$\Delta E(q^2) = \Delta E^{\text{кол}} + \Delta E^{\text{одн}} = 2\hbar D^{\text{кол}} q^2 + \frac{2\hbar}{\tau_0} \left[1 - \frac{\exp(-2W)}{1 + (D - D^{\text{кол}}) q^2 \tau_0} \right], \quad (1)$$

де $D^{\text{кол}}$ – колективний, $D^{\text{одн}} = D - D^{\text{кол}}$ – одностинковий коефіцієнти самодифузії, q – переданий імпульс, τ_0 – середній час життя міжмолекулярного зв'язку досліджуваної рідини, $W = q^2$ – фактор Дебая-Валлера, при $q^2 \ll 1$ з формули (1) одержимо

$$D = D^{\text{одн}} + D^{\text{кол}} = \frac{1}{2\hbar} \frac{\partial \Delta E}{\partial (q^2)}. \quad (2)$$

Величину D можна обчислити, якщо в (2) наближено вважати $\partial \Delta E \approx \delta(\Delta E)$, при цьому зміна розширення $\delta(\Delta E)$ спостерігається експериментально за умови, що відповідне значення $\delta(q^2) \approx \partial(q^2)$ лежить в межах від 0 до $\sim 1,5 \text{ \AA}^{-2}$. Значення $D^{\text{кол}}$ і τ_0 знаходилися фіттуванням залежності $\Delta E(q^2)$ на підставі (1) з фіксованими D та W .

В таблиці 1 наведені розраховані коефіцієнти самодифузії D , $D^{\text{кол}}$ та час τ_0 для чистого бензолу і бензолу з фуллереном C_{60} .

Таблиця 1

Дифузійні параметри, отримані з аналізу експерименту

Зразок	$D \times 10^{-9}, \text{ м}^2/\text{с}$	$D^{\text{кол}} \times 10^{-9}, \text{ м}^2/\text{с}$	$\tau_0 \times 10^{-12}, \text{ с}$
1. Бензол	3.72 (± 0.15)	0.25 (± 0.31)	0.50 (± 0.08)
2. Бензол з фуллереном C_{60}	3.13 (± 0.15)	0.39 (± 0.31)	0.48 (± 0.08)

З аналізу експерименту випливає, що після розчинення фуллерену в бензолі його коефіцієнт самодифузії зменшується ($\sim 15\%$), а колективна складова $D^{\text{кол}}$ збільшується ($\sim 20\%$), що можна пояснити групуванням певної частини молекул бензолу навколо C_{60} . Таким чином, встановлено, що запропонована методика дослідження коефіцієнту самодифузії розчинів бензол- C_{60} є чутливою, в зв'язку з чим виникає питання про мікроскопічний механізм дифузії розчинника, а саме: можливість розділення дифузії на частину, пов'язану з міжмолекулярними зв'язками типу бензол- C_{60} і частину, яка відповідає за проникнення розчинника усередину молекули C_{60} . Тому наступним питанням для нас є дослідження розчинів нанотрубок і фуллеренів $C_{n \geq 60}$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Елецкий А.В., Смирнов Б.М. Фуллерены и структуры углерода // *УФН*. – 1995. – Т.165, №9. – С.977-1009.
2. Безмельницин В.Н., Елецкий А.В., Окунь М.В. Фуллерены в растворах (Обзоры актуальных проблем) // *УФН*. – 1998. – Т.168, №11. – С.1195-1120.
3. Шлак А.П., Куницкий Ю.А., Карбовский В.Л. Кластерные и наноструктурные материалы. – Київ: Академперіодика, 2001. – 587 с.
4. Bulavin L.A., Adamenko I.I., Yashchuk V.M. et al. Self-organization C_{60} nanoparticles in toluene solution // *Journ. Mol. Liq.* – 2001. – Vol.93, No.1-3. – P.187-191.
5. Blau W.J., Byrne H.J., Cardin D.J. et al. Large infrared nonlinear optical response of C_{60} // *Phys. Rev. Lett.* – 1991. – Vol.67. – P.1423-1437.
6. Булавин Л.А. Нейтронные исследования динамики жидкостей. – Київ: Вища школа, 1977. – 27 с.
7. Булавин Л.А., Вербінська Г.М., Вишневський І.М. Квазіпружне розсіяння нейтронів у рідинах. – Київ: АСМІ, 2004. – 86 с.

Надійшла до редколегії 16.05.2006 р.

УДК 539

Копань В.С., професор
Лень Т.А, інженер
Лозовий Ф.В., студент
Мацуї Л.Ю., ст. н. співробітник

Дослідження вуглецевих нанотрубок на електронному мікроскопі.

Методом просвічуючої електронної мікроскопії досліджувались багатостінні вуглецеві нанотрубки (БВН) діаметром від 1 нм до 11 нм. Спостерігались БВН, що були деформовані без присутності зовнішніх сил. Оцінені величини напружень. Пояснено механізм вигину нанотрубок. В БВН зовнішній шар вуглецю може бути частково зруйнованим і це викликає напруження, що змушують нанотрубку вигинатись.

Ключові слова: вуглецеві нанотрубки, електронний мікроскоп, залишкові напруження.

Kopan V.S., professor
Len T.A. engineer
Lozovyi F.V. student
Matsui L.Y., senior res.

Carbon nanotubes investigation using electron microscopy

Multiwall carbon nanotubes (MWCNT) were investigated using TEM. MWCNT with a diameter from 1 nm up to 11 nm were observed. Stress values in different nanotube sections were appreciated. We observed nanotubes which were bended without presence of external forces. The mechanism of nanotubes bending was explained, and also values of forces which acted on nanotubes were appreciated. In MWNT the external sphere of carbon can be partially destroyed and it causes stress which makes nanotubes bended.

Key Words: carbon nanotubes, electron microscopy, residual stress.

E-mail: kopa@pulsary.com.ua

Унікальні електричні та механічні властивості вуглецевих нанотрубок [1,2] відкривають широкі можливості для їх використання в наноелектроніці та наномеханіці. Запропоновано використати нанотрубки в пристроях нанометрового розміру: діоді [3], транзисторі [4], елементарній комірці пам'яті [5], нанопінцеті [6-7], а також в якості голки атомно-силового мікроскопу [8-10]. Було експериментально визначено, що слабка Ван-дер-ваальсівська взаємодія між стінками дозволяє стінкам БВН легко рухатись одна відносно одної, причому цей рух може бути як довільним [11-12], так і контрольованим за допомогою маніпулятора [13]. Теоретично було розглянуто ряд нанопристроїв, що використовують відносний рух стінок нанотрубок: нанопідшипник [14], наноколіщатко [15], нанопружина [13], механічний нановимикач і нанодріль [17].

Нанотрубки можуть бути отримані різними методами, кожний з яких має свої особливості. В залежності від методу виготовлення, нанотрубки мають різні значення границі міцності, модуля Юнга, теплопровідності тощо.

Методика експерименту.

Досліджувались нанотрубки, що були виготовлені методом термічного розпилення графітових електродів з частинками перехідних металів – нікелю, заліза і кобальту в якості каталізаторів.

При використанні електричної дуги з графітовим електродом утворюються переважно БВН, діаметр яких лежить в діапазоні від одного до декількох десятків нанометрів. Окрім цього, такі нанотрубки відрізняються різною хіральністю, що визначає розмаїття їх електричних характеристик. Розподіл нанотрубок по розмірам та куту хіральності критично залежить від умов горіння дуги і не відтворюються від одного експерименту до іншого. Ця обставина, а також розмаїття розмірів та форм нанотрубок, що входять в склад катодного осаду, не дозволяє розглядати даний матеріал як речовину зі стабільними властивостями. Часткове подолання цієї проблеми стало можливим завдяки обробці цього матеріалу сильними окисниками. Метод очистки і обробки нанотрубок за допомогою окислювачів базується на реакційній здатності графітового шару, (що містить шестиатомні графітові кільця, які складають поверхню нанотрубок), яка значно менша для сфероїдальної поверхні, (що також містить деяку кількість п'ятиатомних кілець) [18-19]. Досліджені нами нанотрубки були виготовлені фірмою Carbolex inc. методом термічного розпилення графітових електродів з використанням Ni в якості каталізатора.

Чи не найважливішим при дослідженні наноматеріалів є виготовлення зразків.

Алгоритм приготування зразків з нанотрубок такий:

1. насипаємо певну кількість порошку нанотрубок на предметну сіточку, що використовується в електронній мікроскопії;
2. починаємо втирати скляною паличкою нанотрубки в сіточку;
3. поміщаємо зразок в мікроскоп УЕМВ-100АК (розрізнявальна відстань 0,3-0,5 нм, прискорюючий потенціал 50-100 кВ) для дослідження.

Експериментальні результати, та їх обговорення.

Було отримано серію фотографій БВН з різним збільшенням. На рис. 1 видно, що досліджувані нанотрубки – деформовані. Розглянемо можливі причини за яких нанотрубка може зазнавати подібного вигину.

1. Якщо вуглецевий шестикутник замінити, наприклад на п'ятикутник, семикутник або на два таких дефекти, нанотрубка зігнеться. З різних сторін щодо вигину орієнтація вуглецевих шестикутників виявляється різною. Але зі зміною орієнтації шестикутників відносно осі нанотрубки міняється її електронний спектр, положення рівня Фермі, ширина оптичної щілини і т.п. Зігнута нанотрубка повинна являти собою молекулярний гетероперехід метал-напівпровідник. Якщо розглядати дані відрізки нанотрубки ізольовано, з різних сторін від вигину, то електрони на

рівні Фермі мають різну енергію. У єдиній системі виграш в енергії приводить до перетікання заряду і утворення потенціального бар'єру. Електричний струм у такому переході тече лише в тому випадку, якщо електрони переміщуються з області з більшою енергією Фермі в область з меншою. Інакше кажучи, струм може текти тільки в одному напрямку. "Однобічне" проходження струму через нанотрубку з вигином використовується для створення випрямляючого діода – одного з основних елементів електронних схем [20].

2. У випадку, коли між стінками нанотрубки попадає домішковий атом, виникає вигин БВН.

3. Зруйнований частково один або декілька шарів нанотрубки.

В будь-якому з цих випадків, можна говорити про наявність залишкових напруг, що і викликають вигин нанотрубки. Розглянемо БВН 1 на рис. 1:

Видно, що нанотрубка зігнута нерівномірно. Можна умовно поділити її на три ділянки, кожній з яких буде відповідати свій радіус кривизни (рис. 2). Сили, що діють всередині нанотрубки на кожній з ділянок, розраховуються по формулі 1:

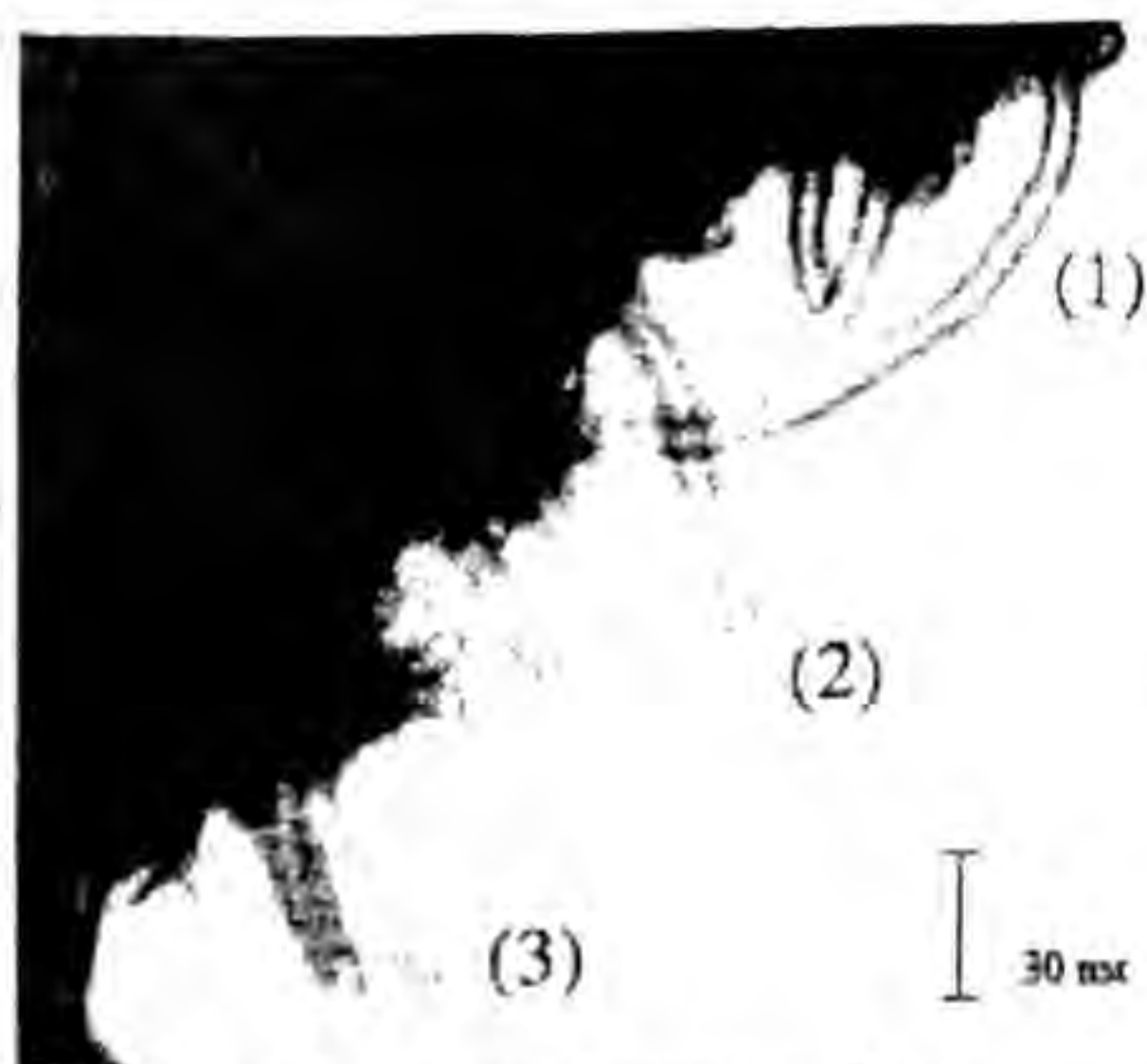


Рис. 1. Зображення нанотрубок, отримане методом ПЕМ (X170000).

$$F = \frac{\pi^2 E (D^4 - d^4)}{RL^2}, \quad (1)$$

де E – модуль Юнга
 D – зовнішній діаметр нанотрубки,
 d – товщина стінки,
 R – радіус кривизни нанотрубки,
 L – відстань між кінцями відрізка.

Сила F стягує відрізок нанотрубки вздовж лінії елемента, як стягує лук тятиву.

Маючи значення сили F , можна оцінити напруги в перерізі за формулою 2.

$$\sigma = \frac{64 F h L^2}{R \pi^3 (D^4 - d^4)}, \quad (2)$$

де h – висота сегмента.

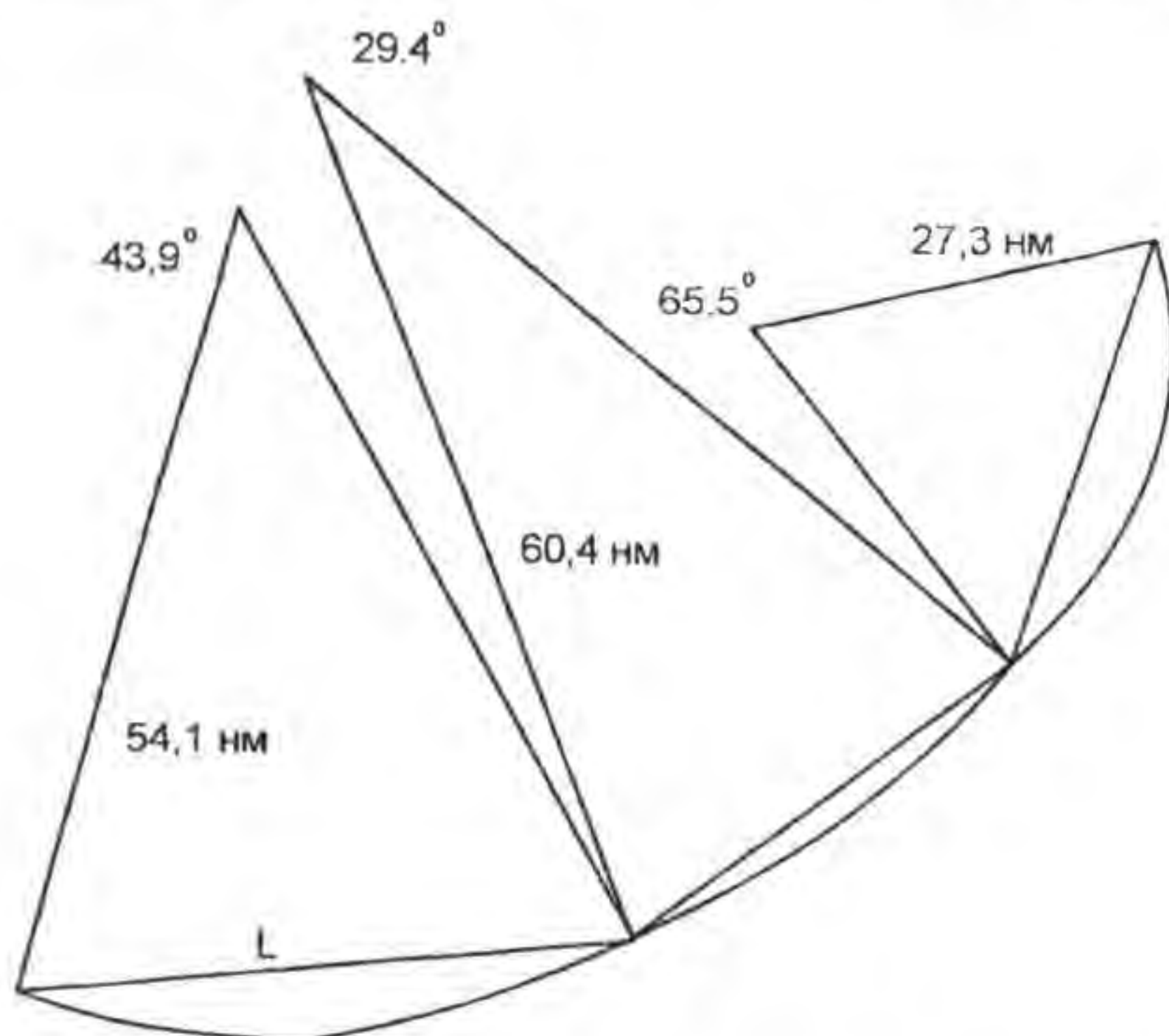


Рис. 2. Схема для розрахунку напруг нанотрубки 1 з рис. 1.

Результати розрахунку поміщені в таблиці 1.

Таблиця 1.

Сили F та середні напруги σ для кожної з ділянок нанотрубки 1 (рис. 1)

№ нанотрубки	R , нм	D , нм	d , нм	L , нм	E , ТПа	$F \cdot 10^{-6}$, Н	$\sigma \cdot 10^{10}$, Па
1	27,3	9	3	39,0	1,8 ¹	237,41	18,96
					1,25 ²	164,87	13,17
					1,28 ³	168,83	13,48
					1,09 ⁴	143,77	11,48
2	60,4	9	3	43,1	1,8	194,39	8,57
					1,25	135,00	5,95
					1,28	138,24	6,09
					1,09	117,72	5,19
3	54,1	9	3	56,8	1,8	111,93	9,57
					1,25	77,73	6,64
					1,28	79,59	6,80
					1,09	67,78	5,79

1. Результат NEC.

2. Treacy *et al.* In 1998.

3. Wong *et al.* in 1997 by AFM

4. E. Hernández and Angel Rubio in 1999.

Необхідність обраховувати напруги з використанням декількох значень модулів Юнга обумовлена неоднозначністю даних при

вимірюванні різними дослідниками.

Для нанотрубок 2 і 3 (рис. 1) доцільно використовувати наступну формулу для обчислення сили:

$$F = \frac{3E\pi\lambda \frac{D^4 - d^4}{64}}{l^3}, \quad (3)$$

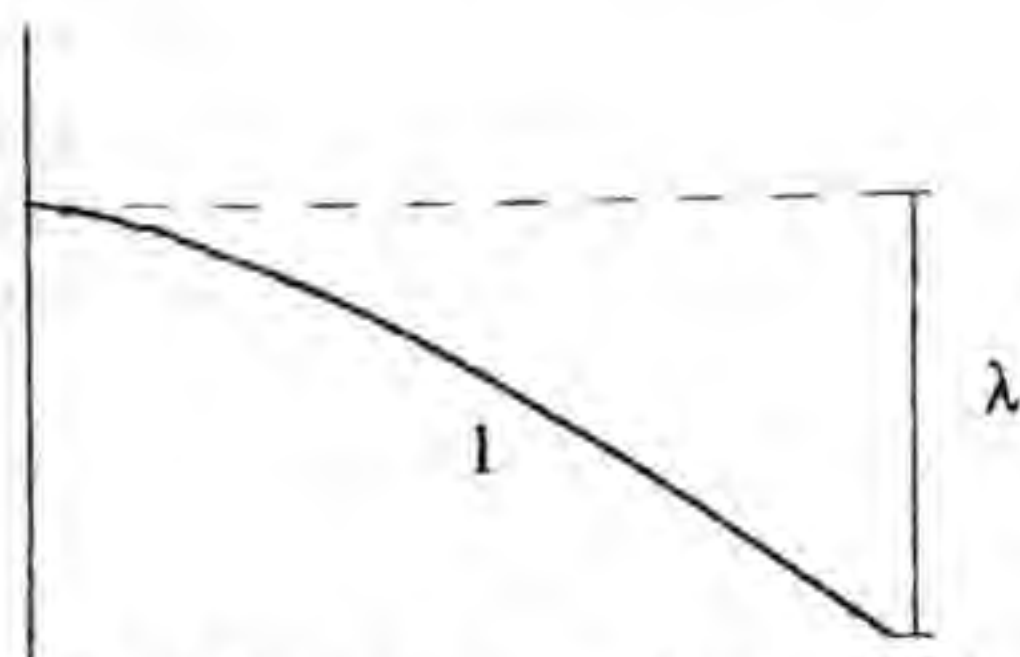


Рис.3. Схема нанотрубок №2 і №3 (рис.1)

λ – стріла прогину,

l – довжина трубки.

Напруження обраховуються за формулою (4):

$$\sigma_x = \frac{M_x}{I}r + \frac{F}{S}, \quad (4)$$

де r – радіус кривизни,

I – момент інерції,

M – згинаючий момент,

S – площа перерізу,

F/S – стискаюча напруга.

Сила F прикладена до вільного кінця нанотрубки і вигинає її.

Значення для сил, що можуть діяти всередині нанотрубки, та середніх напруг для нанотрубок 2 і 3 наведені в таблицях 2 і 3.

Таблиця 2.
Сили P та середні напруги σ для нанотрубки 2 (рис. 1).

D , нм	d , нм	l , нм	r , нм	λ , нм	E , ТПа	$F \cdot 10^{-6}$, Н	$\sigma \cdot 10^{10}$, Па
10.5	3	90.5	166.5	30	1,8	0,14	3,61
					1,25	0,10	2,49
					1,28	0,10	2,57
					1,09	0,09	2,19

Таблиця 3.
Сили P та середні напруги σ для нанотрубки 3 (рис. 1).

D , нм	d , нм	l , нм	r , нм	λ , нм	E , ТПа	$F \cdot 10^{-6}$, Н	$\sigma \cdot 10^{10}$, Па
10.5	3	53,5	40	18	1,8	0,38	1,36
					1,25	0,26	0,95
					1,28	0,27	0,97
					1,09	0,22	0,82

Видно (таблиці 1-3), що напруги в нанотрубці доволі високі. Це свідчить про приблизність моделі, що використовувалась. Зокрема не враховувалось кількість шарів в нанотрубці та взаємодія між ними [21].

Також можлива деяка похибка, обумовлена дифракційними ефектами при проходженні електронами зразка, внаслідок чого товщина стінки визначається неточно.

Висновки.

1. Методом просвічуючої електронної мікроскопії досліджувались напруги в багатостінних вуглецевих нанотрубках діаметром від 1 нм до 11 нм. Спостерігались нанотрубки, що були деформовані без явної присутності зовнішніх сил. Наявність вигинів пояснюються залишковими напругами, що були внесені в БВН при виготовленні зразків.
2. Оцінені величини сил, що діють на нанотрубку. Ці сили змінюються від $0,23 \cdot 10^{-6}$ Н до $237,4 \cdot 10^{-6}$ Н.
3. В багатостінних вуглецевих нанотрубках зовнішній шар вуглецю може бути частково зруйнований, а це може викликати напруги, що змушують нанотрубку вигинатись. Середні механічні напруги на БВН становлять $6,33 \cdot 10^{10}$ Па. Це свідчить про велику міцність БВН.

Список використаної літератури.

1. S. Iijima. J. Cryst. Growth 50, 675 (1980).
2. S. Iijima. Nature 345, 634, 56 (1991).
3. R. Tamura. Phys. Rev. B 64, 20, 204404@ (2001).
4. S.J. Tans, A.R.M. Verscueren, C. Dekker. Nature 393, 6680, 49 (1998).
5. T. Rueches, P. Kim, E. Joselevich, G.Y. Tseng, C.L. Cheng, C.M. Lieber. Science 289, 5476, 94 (2000).
6. P. Kim, C.M. Lieber. Science 286, 5449, 2148 (1999).
7. S. Akita, Y. Nakayama, S. Mizoola, Y. Takano, T. Okawa, Y. Miyatake, S. Yamaraka, M. Tsuji, T. Nosaka. Appl. Phys. Lett. 79, 11, 1691 (2001).
8. S.S. Wong, E. Joselevich, A.T. Wolley, C.L. Cheng, C.M. Lieber. Nature 394, 6688, 52 (1998).
9. J.H. Haffier, C.L. Cheung, C.M. Lieber. Nature 398, 6730, 761 (1999).
10. S.P. Jarvis, T.Uchihashi, T. Ishida, H. Tokumoto, Y.Nakayama. J. Phys. Chem. B. 104, 26, 6091 (2000).
11. M.F. Yu, O. Lourie, M.J. Dyer, K. Moloni, R.S. Ruoff. Science 287, 5433, 637 (2000).
12. M.F. Yu, B.I. Yakobson, R.S. Ruoff. J. Phys. Chem. B. 104, 37, 8764 (2000).
13. J. Cumings, A. Zettl. Science 289, 602 (2000).
14. R.E. Tuzun, D.W. Noid, B.G. Sumpter. Nanotechnology 6, 2, 52

- (1995).
15. D.W. Srivastava. Nanotechnology 8,4, 186 (1997).
 16. L. Forro. Science 289, 5479, 560 (2000).
 17. Yu. E. Lozovik, A.V. Minogin, A.M. Popov. Microelectronic Engeneering, in press.
 18. Sun Xiao-gang, Zeng Xiao-shu// Weinadianzi iishu = Micronanoelectron Technol. 2003 40, #9 p.19-21.
 19. Покропивный А.В. Покропивный В.В. // Письма в ЖТФ 2003.29, № 12, с.21-24 16.
 20. Geohegan D.B., Puretsky A.A., Ivanov I.N., Jesse S., Eres G., House J.Y. // Appl. Phys. Lett. 2003.83, #9 p.1851-1853
 21. Frank S., Poncharal P., Wang Z.L. et al. // Ibid. 1998. V.280. p.1744-1746.
 22. Ю.Е. Лозовик, А.М. Попов, А.В. Беликов. // Физика твердого тела, 2003, том. 45, вып. 7.

Надійшла до редколегії 6 квітня 2006 р.

УДК 519.2

Корнієнко М.Є., ст. наук. співр.

M. Ye. Korniyenko, senior res.

**Квантові закономірності в
водних розчинах електролітів**

**Quantum behaviors in water
solutions of electrolytes**

**1. Природа розчинності
речовин в воді і гідратації іонів**

**1. The nature of substances
solubility in water and
hydrations of ions**

Розглянуто історичні передумови становлення і розвитку квантових уявлень для водних розчинів електролітів і гідратації іонів. Проводиться ідея, що в рідинах в результаті відсутності далекого порядку реалізуються більш широкі можливості квантово-хімічної взаємодії і структуроутворення. Встановлено, що розчинність речовин, що іонізуються, зростає при зменшенні температур плавлення T_m відповідних кристалів, що вказує на зміни електронних станів. Для ряду речовин температурна залежність розчинності закінчується в точці плавлення. В розчинах електролітів відбувається перебудова іонів з компенсацією їх зарядів за рахунок перерозподілу електронної густини в сітці водневих зв'язків. При цьому навколо іонів формуються області розподілу зв'язаних зарядів, а енергії гідратації в розрахунку на один іон визначаються енергіями іонізації відповідних атомів.

Historical preconditions of formation and development of quantum representations for water solutions of electrolytes and hydration of ions are considered. The idea is developed, that in liquids as a result of absence of the far order, ample opportunities of quantum-chemical interaction and structure formation are realized more. Increase of solubility of ionized substances is revealed at decrease of melting temperatures T_m of corresponding crystals that specifies change of electronic conditions. In a number of substances temperature dependence of solubility comes to an end in a melting point. In solutions of electrolytes occurs reorganization of ions with indemnification of their charge as a result of redistribution of electronic density in a grid of hydrogen bonds. Thus around of ions, areas of bound charge distribution are formed, and energies of hydration in anticipation of one ion are determined by ionization energies of corresponding atoms.

Ключові слова: розчин, гідратація іонів, енергія іонізації, квантові властивості.

Key Words: solution, hydrations of ions, ionization energie, quantum property.

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

Вступ

Незважаючи на майже столітній розвиток квантової механіки, квантові уявлення розвинуті в основному для атомів і молекул. При дослідженні неупорядкованих конденсованих середовищ (рідини, розчини електролітів, аморфні метали і стекла) в основному використовується класичний підхід і відповідна термінологія [1]. При чисельних розрахунках властивостей некристалічних станів речовини методами молекулярної динаміки і Монте-Карло в більшості випадків також застосовується

класичний підхід, який дозволяє розглядати значно більшу кількість взаємодіючих частинок в порівнянні з квантовими розрахунками. Складнощі теоретичного аналізу конденсованого стану зумовлюються недостатністю даних про потенціали взаємодії, тому звичайно використовуються типові модельні потенціали двохчастинкових або трьохчастинкових взаємодій [1]. Але такий підхід обмежений в результаті взаємодії різних зв'язків і недостатністю врахування взаємодій малої кількості частинок. Для адекватного опису властивостей конденсованого стану і, зокрема, його довгохвильових збуджень необхідно враховувати число атомів чи молекул порядку числа Авогадро. Це зумовлено спостереженням розмірних ефектів для коливальних спектрів водних середовищ. Надзвичайно велика кількість складових частинок не дозволяє проводити розрахунок квантових станів рідин і аморфних речовин навіть з допомогою сучасної обчислювальної техніки. Ситуація в даному випадку більш складна ніж при застосуванні класичних рівнянь руху для газів. По результатам наших оригінальних досліджень нові спектральні особливості води проявляються при кількості речовини порядку 50 моль, що вказує на складність використання шляху чисельних обчислень і в майбутньому. Приклад квазікристалів і неспіврозмірних фаз показує, що далекий порядок може реалізуватися не тільки шляхом строго періодичного впорядкування. Імовірно, для некристалічних станів речовини без жорсткої вимоги періодичності потенціалу можуть реалізуватися більш широкі можливості квантово-хімічної взаємодії і структурного впорядкування. Тому розвиток послідовних квантових уявлень для макроскопічних станів речовини є важливою фізичною проблемою і необхідний для розгляду широкого кола макроявищ на основі єдиних фундаментальних положень, розвитку новітніх технологій, а також створення наукової бази сучасної біології і медицини. Тільки на такій сучасній науковій базі можлива інтеграція природничих наук. В зв'язку з цим необхідний пошук нових підходів до розвитку квантової теорії складних систем.

Нові особливості рідкого і склоподібного стану речовини виявлялись в аномальних спектральних розширеннях і кутовій дифузії випромінювання при дії інтенсивного лазерного світла на речовину (1963-1965 рр.), що не було відомо в час становлення квантової механіки. Можливість розвитку нової концепції конденсованого стану речовини показана в циклі робіт [2-19]. В них на основі сучасних експериментальних даних і єдиного ідейного підходу досліджуються колективні властивості елементарних збуджень в чистих рідинах і розчинах. На основі цього розвинута нова концепція фазових переходів (ФП) плавлення і кипіння. Була відкрита фоновна дискретність прихованих теплот переходів для широкого кола речовин з ковалентними, іонними, металевими і молекулярними типами взаємодій. Це дозволило сформулювати нову нелінійно-квантову концепцію конденсованого стану речовини.

Метою даної роботи є подальший розвиток квантових уявлень для складних багаточастинкових систем на прикладі водних розчинів електролітів (солей, кислот і лугів). Вперше показана залежність розчинності речовин від їх температур плавлення. Встановлена фізична природа явища гідратації іонів в водних розчинах електролітів, пов'язана з суттєвою перебудовою іонів і компенсацією їх зарядів. Правильність запропонованої ідеї підтверджується встановленою кореляцією енергій гідратації в рядах різних катіонів (включаючи багатозарядні) і аніонів з загальними енергіями іонізації відповідних атомів.

1. Передумови розвитку квантової теорії складних конденсованих систем

Проблеми розчинності речовин і гідратації (сольватації) іонів являються центральними в природознавстві і виходять за межі фізики, хімії і біології [20,21]. Під гідратацією слід розуміти всі ефекти взаємодії іонів з водою в розчинах електролітів. Сольватація характеризується взаємодією іонів з іншими розчинниками, наприклад спиртами, ацетоном, CS_2 , CCl_4 , C_6H_6 тощо. В результаті складності цих проблем вони мало досліджені в сучасній науці. Значний внесок в розвиток правильних поглядів на природу розчинів вніс Д.І.Менделєєв, але більшість його сучасників не усвідомили всієї широти і глибини його ідей, спрощено звівши їх до уявлень про наявність гідратів і протиставлення «фізичної» і «хімічної» точок зору на процеси розчинення і природу розчинів. Цьому сприяли розвиток в 1886-87 рр. осмотичної теорії Вант-Гоффа і теорії електролітичної дисоціації Арреніуса, а також вручення їм Нобелівських премій. Слід відзначити, що перед цим протягом майже двох століть домінувала думка про обов'язкову дію якоїсь «хімічної спорідненості» в процесі розчинення. Період 1840-1887 рр. можна назвати часом «гегемонії хімічної теорії розчинів» [22], але все змінилося після Вант-Гоффа і Арреніуса. Менделєєв розумів, що «два підходи до розчинів, без всякого сумніву, з часом, по всій ймовірності, приведуть до загальної теорії, тому що одні загальні закони керують як фізичними, так і хімічними явищами» [23]. І навіть після видимого тріумфу підходів Вант-Гоффа і Арреніуса він писав, що «...в історії нашої науки гіпотеза електролітичної дисоціації займе з часом таке ж місце, яке належить уже давно флогістону» [24]. На нашу думку ідеї Д.І.Менделєєва передбачали існування квантових закономірностей для неупорядкованих конденсованих станів, хоча в ті роки тільки починали розвиватися квантові уявлення для атомів. Вони явно випереджали час і не могли бути чітко сформульованими, а тим більше бути зрозумілими для інших.

Послідовний розвиток нових уявлень про квантову природу некристалічних конденсованих станів почався з робіт [2-19]. На основі їх можна виділити чотири принципово нові напрямки досліджень: 1)

Розвиток концепції колективних властивостей коливальних збуджень в рідинах на основі методів лінійної і нелінійної спектроскопії [2-10]; 2) Спостереження низькочастотних акустичних, лібраційних і трансляційних мод рідин в вищих коливальних станах при їх відсутності в низькочастотній області [2,11]; 3) Нелінійно-хвильові механізми ФП і ефекти сильної фонон-електронної взаємодії [12-14]; 4) Роль колективних коливальних мод рідин і їх обертонів в явищах макрофізики, наприклад, теплопровідності і поширенні звуку [15-17]. Зокрема існування колективних властивостей коливальних збуджень в рідинах було показано як теоретично, так і методами спектроскопії комбінаційного розсіяння і інфрачервоного поглинання, а також вимушеного комбінаційного розсіяння [2-8]. Достовірність цих результатів підтверджується спостереженням колективних властивостей коливальних мод в багатьох органічних і неорганічних рідинах, а також добрим узгодженням результатів з обширними даними по оптичним сталим рідинам [25]. Для рідкого CCl_4 наявність колективних властивостей підтверджується також методом гіперкомбінаційного розсіяння світла [9-10].

На існування особливих невідомих раніше квантових властивостей рідин вказувало чітке спостереження трьох акустичних і двох лібраційних коливальних мод рідкого CS_2 в області вищих коливальних станів навіть поблизу температури кипіння [11]. Тому всі рідини і розчини як і надплинний гелій слід відносити до квантових систем. Існування поздовжніх і поперечних акустичних хвиль в рідкому CS_2 , а також збереження колективних коливальних мод навіть при значному зменшенні концентрації в розчинах, вказує на існування далеких кореляцій в поведінці молекул, що не було відомо раніше. На нашу думку, в рідкому стані речовини закономірності впорядкування молекул не менш складні ніж в квазікристалах. Наші дослідження природи ФП показало, що процеси плавлення і кипіння є повністю нелінійно-квантовими і не мають лінійних аналогів [12-14]. Як постійна температура плавлення є наслідком наявності далекого порядку і колективних властивостей кристалів, так і фіксована температура кипіння є яскравим підтвердженням існування колективних властивостей рідин [13]. Всі ФП 1-го роду пов'язані з сильною фонон-електронною взаємодією і не можуть бути описані в адіабатичному наближенні, яке широко використовується в теоретичній фізиці. Незастосовність класичного підходу до рідин зумовлена також тим, що рух атомів нерозривно пов'язаний з електронною підсистемою, поведінка якої суцільно квантова. В зв'язку з цим необхідно поглиблювати фізичні уявлення про більшість макроскопічних явищ з участю рідин, таких як теплопровідність, в'язкість, поширення звуку, та інше [15-17].

В зв'язку з складністю і комплексністю розглядуваних проблем необхідно більше уваги приділяти розвитку загальних фізичних концепцій некристалічного стану речовини, а не чисельному моделюванню окремих

систем. Для цього необхідний більш тісний взаємозв'язок експериментальних і теоретичних методів дослідження. Зокрема, приклад квазікристалів показує, що просторова періодичність впорядкування кристалів не є єдиною можливістю реалізації далекого порядку. Для розвитку нових квантових уявлень в фізиці неупорядкованого стану в першу чергу необхідно більш повно використовувати результати спектральних досліджень, які містять детальну інформацію про квантові енергетичні стани. Зокрема, виявлені методами коливальної спектроскопії низькочастотні колективні поперечні і поздовжні (ТО і LO) моди сітки водневих зв'язків (ВЗ) води показують хорошу зв'язність її структури [2]. Спектральні дослідження насичених водних розчинів солей, кислот і лугів з елементами різних груп періодичної системи показали дивовижно високу стійкість сітки ВЗ [26,27]. Навіть при гранично високих концентраціях солей, наприклад LiCl, коли на пару іонів Li^+ і Cl^- припадає трохи більше 4-х молекул води, колективні моди сітки ВЗ майже не змінюються. Колективний характер системи ВЗ проявляється навіть при малих концентраціях води в кристалогідратах, наприклад, в $\text{BaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Для багатьох водних розчинів частоти коливальних мод сітки ВЗ можуть зменшуватись або зростати в порівнянні з чистою водою, але в більшості випадків ніяких нових коливальних мод не виникає. Це вказує на утворення єдиної системи водно-електролітних зв'язків зі спільними коливальними модами. Отже катіони і аніони вбудовуються в сітку ВЗ з участю квантово-хімічних сил зв'язку. Більш детально результати спектральних досліджень води і водних розчинів електролітів, які слугуватимуть додатковому обґрунтуванню необхідності розгляду їх квантових властивостей, будуть опубліковані окремо. В цій серії робіт планується розглянути великий об'єм сучасного експериментального матеріалу по водних розчинах електролітів. Відомі дані по енергіях гідратації, розчинності ряду солей в воді, температурам замерзання, питомих густинах, в'язкості і електропровідності розчинів електролітів будуть аналізуватися з єдиних ідейних позицій – ролі колективно-квантових властивостей неупорядкованих конденсованих станів речовини в різних макроскопічних явищах.

2. Подібність процесів розчинення і плавлення

Згідно сучасній моделі плавлення [12,14] воно обумовлено нестійкістю основного електронного стану, а отже і структури кристалів, відносно термічного збудження вищих коливальних станів. Енергії збудження обертонів і складових тонів визначають теплоти переходів і трансформацію електронних станів при ФП [12-14]. Процеси розчинення пов'язані з енергією міжчастинкових взаємодій в конденсованому стані речовини. Відомо, що розчинення речовини вимагає подолання сил взаємодії не тільки між складовими частинками кристалів, що

розчиняються, але і між молекулами розчинника. Ці затрати енергії компенсуються енергією сольватації, а в водних розчинах - енергією гідратації. Енергії гідратації – сольватації, тобто енергії зв'язків в нових структурах, повинні бути рівними або перевищувати енергію попередніх хімічних зв'язків, що визначає теплові ефекти розчинення. Особливість некристалічного стану речовини полягає в тому, що відсутність далекого порядку дозволяє отримати енергетично більш вигідне впорядкування речовини при переході до іонізованих форм з більшою енергією зв'язку. В цьому полягає суть електролітичної дисоціації речовин в процесах розчинення. Локально високі енергії зв'язків є характерною особливістю рідкого стану речовини. Реалізації таких зв'язків в кристалах перешкоджає далекий порядок. Але в цілому в розчинах існує більша просторова неоднорідність енергій зв'язків в порівнянні з кристалами. І часто найбільш слабкі зв'язки визначають видиму поведінку речовини. Наприклад, енергії зв'язків в графітовій площині значно вищі ніж в алмазі, але більш слабкі вандерваальсові сили між окремими графітовими шарами визначають м'якість графіту. Існування найбільш сильних зв'язків в рідинах може пояснювати природу більшості хімічних реакцій в водних чи інших типах розчинів. По цій причині розчинник слід розглядати як проміжний агент, що безпосередньо приймає участь в хімічних реакціях, що тривалий час залишалося незрозумілим [21].

На основі цієї ідеї і вивчення обширного експериментального матеріалу по розчинності різних речовин в воді [28,29] ми виявили невідому раніше закономірність зв'язку розчинності різних класів речовин з їх температурами плавлення T_m . Встановлена кореляція між значеннями T_m і розчинністю хлоридів лужних металів і сульфатів двовалентних металів при фіксованій температурі, наприклад, рівній 100°C , показана на рис.1a,b. Такі ж кореляції спостерігались для рядів других речовин. Зі зменшенням температури плавлення розчинність речовин суттєво зростає. Для визначеності ці залежності апроксимувались експоненціально спадаючою або лінійною функціями, параметри яких вказані на рисунку. При нагріванні сульфатів цинку і міді, заліза і марганцю вони розкладаються і не досягають температури плавлення. Тому ці солі випадають із розглядуваної кореляції.

Додаткові докази подібності процесів плавлення і розчинності речовин можна привести на основі розгляду закономірностей плавлення кристалогідратів. Відомо, що кристалогідрати можуть містити різну кількість молекул води в розрахунку на одну формульну одиницю. Наприклад, в кристалах $\text{CaCl}_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ n може бути рівним 1, 2 або 6. З ростом вмісту кристалізаційної води температури плавлення дуже сильно зменшуються, що показано на рис.2a. При плавленні кристалогідратів вони фактично розчиняються в своїй власній структурній воді. Крім того існують і безводні кристали, які плавляться при більш високій температурі.

Відомо також велике число речовин (NaOH , LiClO_4 , NH_4NO_3 і др.), які можуть утворювати водні розчини високих концентрацій (до 100% концентрації включно). При гранично малих концентраціях води в розчинах цих речовин, їх криві розчинності починаються при T_m , що показано на рис.2b і доказує подібність процесів плавлення і розчинення. Причому з ростом концентрації води температури розчинів як і значення T_m для кристалогідратів зменшуються. Залежність розчинності від температур плавлення речовин, що розчиняються, а також взаємоузгодженість температур плавлення і вмісту структурної води в кристалогідратах, згідно результатам робіт [12-14] ясно вказує на перебудову її квантово-електронних станів, що більш детально буде розглянуто в наступному розділі.

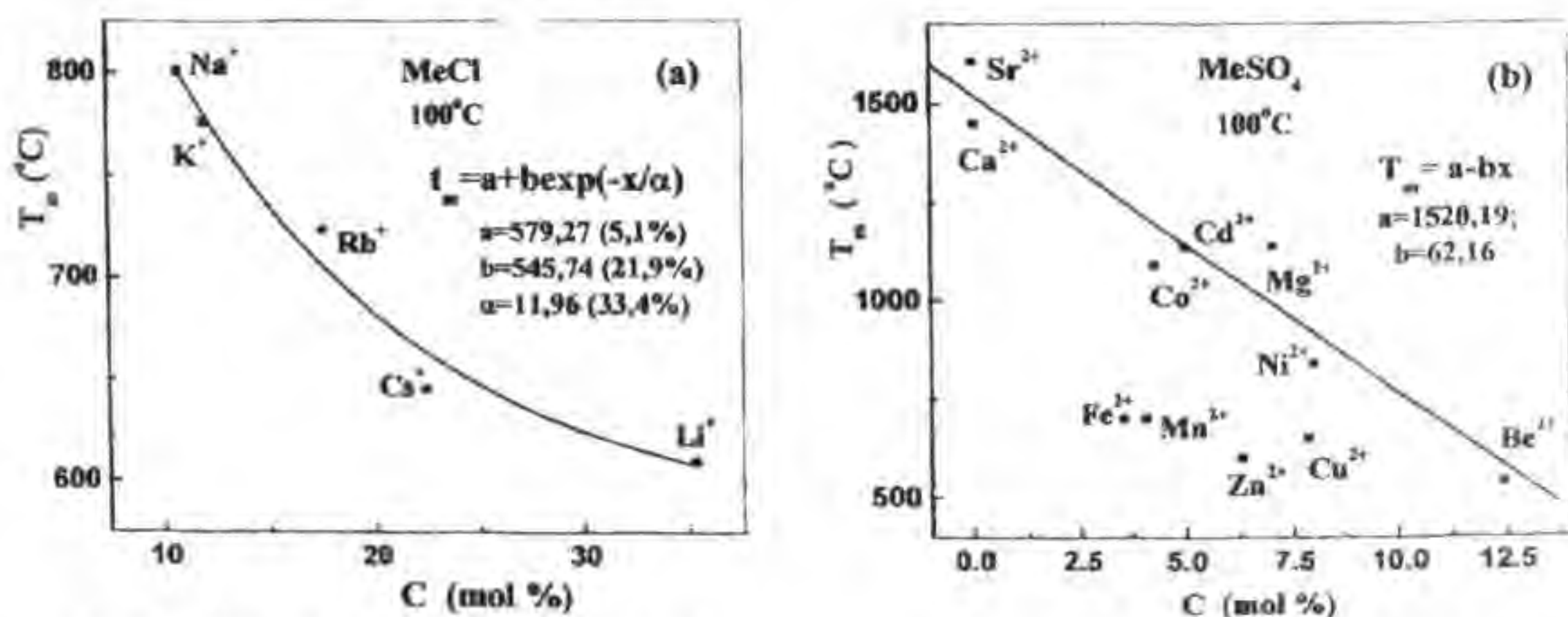


Рис.1. Кореляційні залежності розчинності і температур плавлення хлоридів лужних металів (а) і сульфатів металів (б).

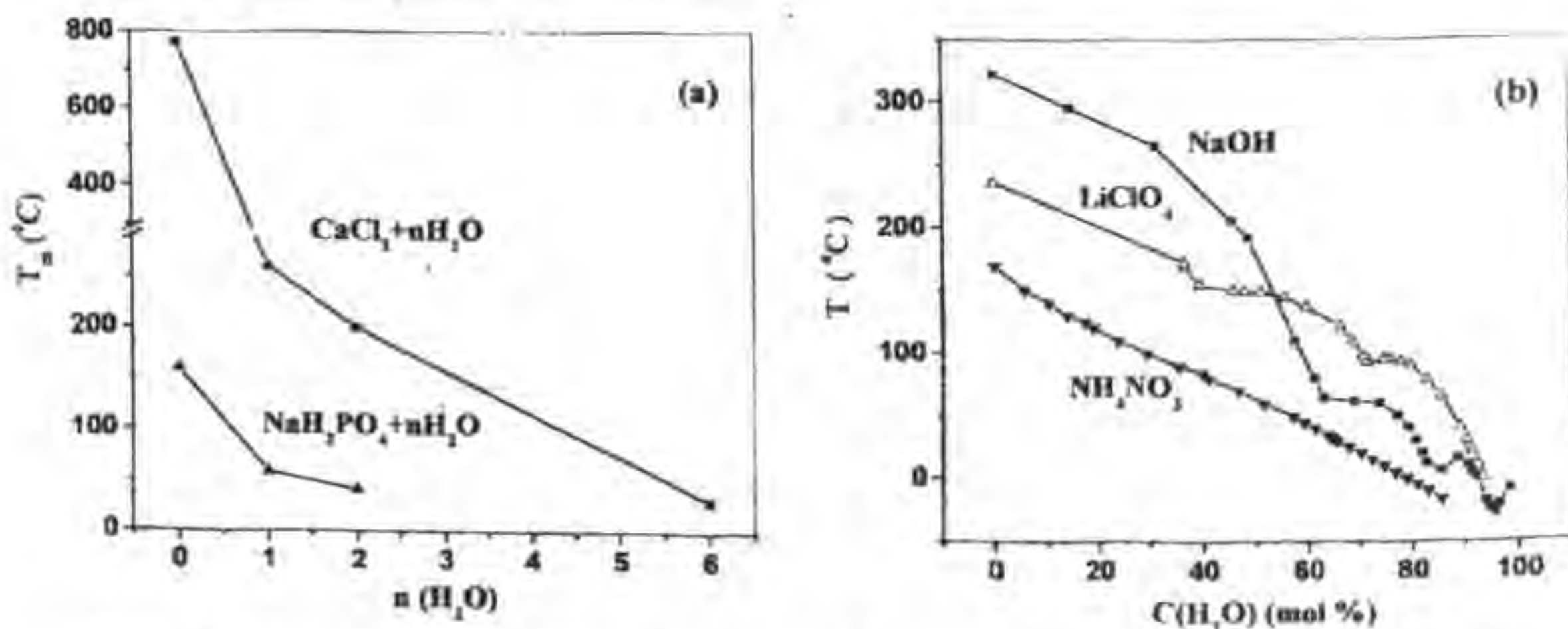


Рис. 2. Залежності температур плавлення кристалогідратів від кількості молекул кристалізаційної води (а) і взаємозв'язок розчинності деяких електролітів від температур розчину (б).

3. Зв'язок гідратації іонів з енергіями іонізації і перебудова іонів в розчинах

До особливих квантових властивостей складних систем можна віднести явище електролітичної дисоціації і саме існування сольватованих (гідратованих) іонів. Це явище досить складне і його природа не розкрита повністю [30]. З попереднього розділу ясно, що природа цього явища квантова і пов'язана з можливістю утворення максимально сильних локальних зв'язків, які в кристалах заборонені існуванням далекого порядку. В результаті утворення іонів в розчинах електролітів, відповідні розчинники називаються іонізуючими. Згідно результатам наших спектральних досліджень водних розчинів електролітів система ВЗ води надзвичайно стійка до дії різних катіонів і аніонів [26,27]. В зв'язку з цим для води незастосовна орієнтаційна модель впорядкування води в сильному електричному полі іонів, що підтверджується також результатами рентгенографічних досліджень.

З відомих енергій іонізації атомів і іонів і спорідненості атомів і молекул до електронів [31] слідує, що заповнені електронні рівні в аніонах розміщені завжди вище в порівнянні з рівнями електронів в катіонах. В результаті електрони від аніонів повинні переходити на розміщені нижче вільні рівні катіонів. В газах іони швидко релаксують при зіткненнях і взаємодії зі стінками. В той же час іони в розчинах є досить стійким, причина чого була незрозумілою з часу відкриття М.Фарадеєм електролізу в 1834 г. Унікальні властивості розчинів електролітів, на нашу думку, можуть бути пояснені суттєвою перебудовою енергетичної структури іонів в розчинах. Для усунення рекомбінації іонів в розчинах рівні катіонів повинні підвищуватись, а аніонів – знижуватись, щоб розміщуватись нижче від вільних рівнів катіонів. Але одночасно повинна бути відсутня рекомбінація іонів на стінках. Для цього зайняті електронами рівні речовин повинні розміщуватись нижче вільних рівнів катіонів і вище зайнятих рівнів аніонів. Це й показує шлях розв'язання проблеми. Зокрема, стінки можуть бути виготовлені з металу, який відповідає катіонам. В цьому випадку модифіковані рівні катіонів після його гідратації повинні розміщуватись поблизу рівнів нейтральних атомів. Тобто катіони металів в розчинах електролітів повинні фактично відновлюватись до станів нейтральних атомів. По відношенню до інших металів ситуація буде ускладнюватись утворенням відповідних подвійних електричних шарів.

Для експериментального підтвердження цієї концепції були проаналізовані відомі енергії гідратації E_h окремих іонів включаючи багатозарядні [21,32]. Значення E_h для однозарядних катіонів зростають від 281 кДж/моль для Cs^+ до 1110 кДж/моль для іона H^+ . Енергії гідратації двозарядних іонів зростають від 1340 кДж/моль для іонів Ba^{2+} до 1616 кДж/моль для Ca^{2+} . Для групи іонів Cd^{2+} , Hg^{2+} , Mn^{2+} , Co^{2+} величини E_h змінюються в інтервалі 1838-1884 кДж/моль, для Mg^{2+} і Fe^{2+} досягають

1955 кДж/моль, а для іонів Co^{2+} і Ni^{2+} - відповідно 2089 і 2139 кДж/моль. Для двозарядних іонів максимальну величину $E_h = 2516$ кДж/моль має іон Be^{2+} . Для тризарядних іонів значення E_h зростають в ряду $\text{La}, \text{Ce}, \text{Fe}, \text{Al}, \text{Ga}$ і змінюються в інтервалі 3333-4735 кДж/моль. Ще більше значення 6657 кДж/моль досягається для чотирьохзарядного іону Ce^{4+} . Раніше ці величини не мали чіткого фізичного змісту, який вперше встановлено в даній роботі.

Для розкриття фізичної природи процесів гідратації аналогічно попереднім роботам автора [12-14] проведені розрахунки енергій гідратації E_{h1} в розрахунку на один іон. Для іону H^+ величина $E_{h1} = 11,5$ еВ дійсно виявилась близькою до енергії іонізації 13,6 еВ атому водню. Для однозарядних іонів спостерігається хороша лінійна кореляція значень E_{h1} і енергій іонізації E_{ion} відповідних атомів. Для двозарядних іонів вивчалася кореляція величин E_{h1} і енергій іонізації однозарядних іонів E_{2ion} , а також сумою двох послідовних енергій іонізації $E_{1ion} + E_{2ion}$. Виявилось, що встановлена для однозарядних іонів кореляція краще продовжується для суми енергій іонізації, що показано на рис.3а. Причому експериментальні точки для іонів H^+ і Ba^{2+} досить близькі. А при допущенні кореляції величин E_{h1} з енергіями іонізації однозарядних іонів лужно-земельних металів E_{2ion} спостерігається зсув експериментальних точок відносно кореляційної залежності для однозарядних іонів (див. рис.3а). Це підтверджує знайдену вище на основі загальних міркувань концепцію про

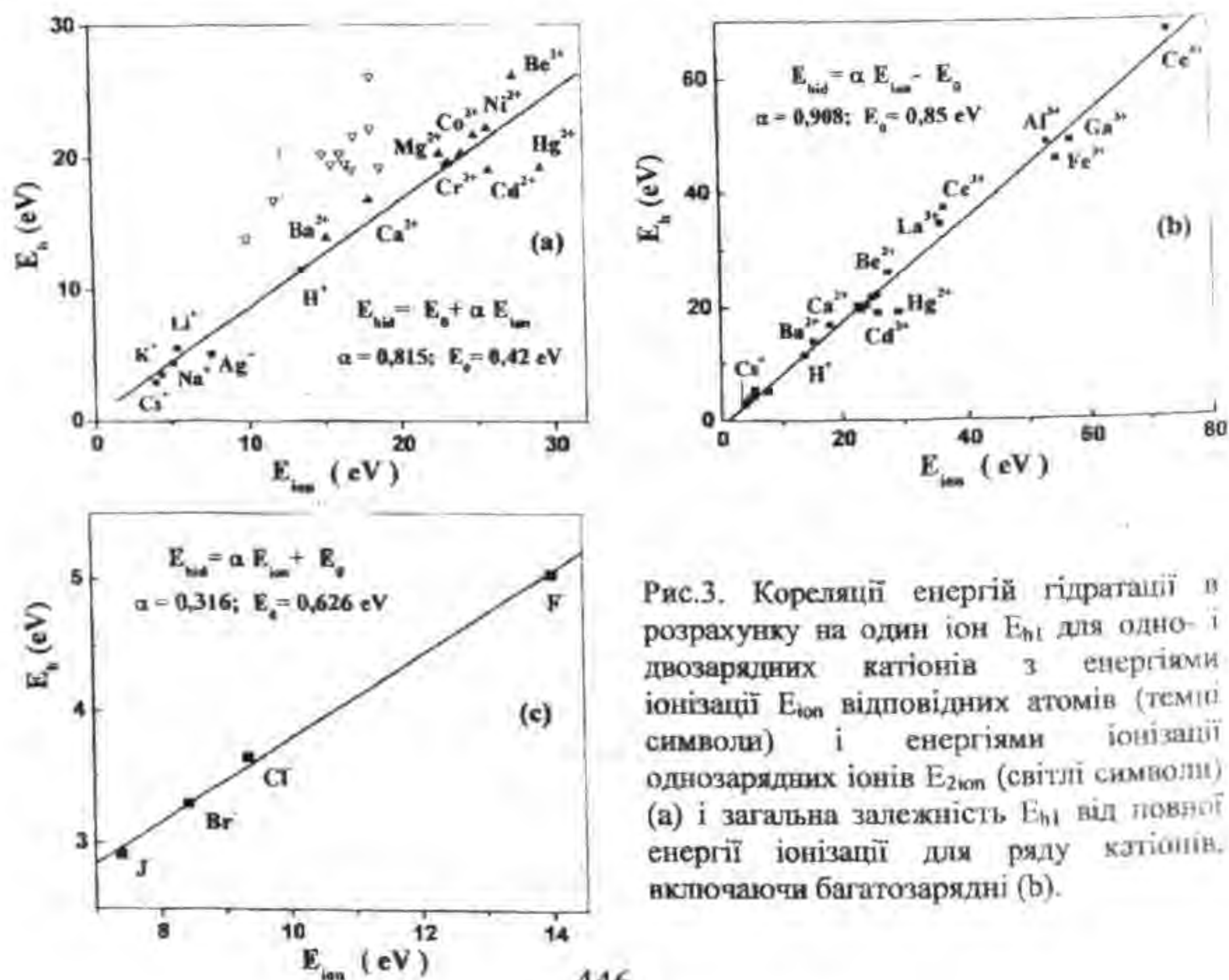


Рис.3. Кореляції енергій гідратації в розрахунку на один іон E_{h1} для одно- і двозарядних катіонів з енергіями іонізації E_{ion} відповідних атомів (темні символи) і енергіями іонізації однозарядних іонів E_{2ion} (світлі символи) (а) і загальна залежність E_{h1} від повної енергії іонізації для ряду катіонів, включаючи багатозарядні (б).

відновлення іонів до нейтральних атомів, тобто компенсацію зарядів іонів в розчинах. Для 3- і 4-х зарядних іонів також спостерігається хороша кореляція з сумами енергій всіх послідовних енергій іонізації відповідних атомів для отримання потрібних іонів. Загальна картина кореляції енергій гідратації E_h для всіх досліджених катіонів показана на рис.3б. Лінійна кореляція виконується дуже добре, а деякі відхилення можуть бути обумовлені як неточністю експериментального визначення значень E_h , так і специфічними особливостями гідратації катіонів перехідних елементів, наприклад, Hg^{2+} і Cd^{2+} .

Дослідження кореляції величин E_h і E_{ion} для ряду різноманітних катіонів показало, що вона добре апроксимується лінійною залежністю $E_h = E_0 + \alpha E_{ion}$. Аналогічна залежність добре справджується і для аніонів галогенів, що показано на рис.3с. Відмінність іонів в розчині від вільних проявляється в тому, що для катіонів $E_0 = -0,85$ eV, а для аніонів ця величина позитивна (0,63 eV). Особливості гідратованих іонів проявляються також в тому, що коефіцієнти пропорційності α менші 1: для катіонів $\alpha = 0,91$ і аніонів галогенів 0,32. Відмінності α від 1 вказують на відмінності іонів електролітів від нейтральних атомів. Зв'язок явища гідратації з енергіями іонізації вказує на його квантову природу. В зв'язку з цим його не можна розглядати класично-термодинамічно, як це робилося в великій кількості попередніх публікацій.

Отримані результати свідчать, що заряди іонів компенсуються в результаті перерозподілу зарядів при взаємодії іонів з електронною і протонною підсистемами води. В результаті перебудови квантово-хімічних зв'язків заряди іонів як би розподіляються по більшій просторовій області, що відповідає суттєвому зменшенню енергії електростатичних полів навколо іонів. При цьому іони відновлюються до станів, близьких до нейтральних атомів. Але ці стани не можна ототожнювати, бо нейтральні атоми вільні, а відновлені іони в розчинах зв'язані. Суттєво, що в конденсованій воді і других діелектричних рідинах немає вільних електронів (при відсутності відповідних хімічних реакцій), які б могли компенсувати заряди катіонів. Електрони, які утворюються в воді при дії іонізуючого випромінювання, також гідратуються і характеризуються характерними широкими смугами поглинання з максимумом 720 нм (час життя $\sim 2 \cdot 10^{-5}$ с). Тому перебудова структури іона в водних розчинах можлива тільки з участю зв'язаних електронів чи протонів. В результаті вбудовування катіонів в структуру води і утворення єдиної водно-електролітної системи зв'язків, компенсація зарядів катіонів повинна здійснюватись з участю багатьох електронів. Причому густина електронного заряду переноситься від оточуючих молекул води до катіону. Гідратовані іони в водних розчинах являють собою особливий стан речовини, коли невисвободжені валентні електрони катіонів компенсуються за рахунок зв'язаних електронів води, а заряди аніонів - за рахунок

зміщень протонів. Це обумовлено як прагненням до мінімуму енергії так і наявністю сітки водневих зв'язків і відсутністю далекого порядку.

Таким чином, в водних розчинах гідратовані катіони являють собою майже нейтральні атоми, оточені атмосферою розподілених позитивних зарядів. Це відповідає формуванню зарядових атмосфер в сітках ВЗ. Слід відмітити, що про зарядові атмосфери навколо іонів в розчинах говорилося в класичній роботі П. Дебая і Е. Хюккеля 1923 р.[33], але там в цей термін вкладався зовсім інший зміст. В [33] мова йшла про статистичний розподіл іонів протилежного знаку в електростатичному полі вибраного іону. Тобто в теорії Дебая і Хюккеля отримується протилежний знак заряду атмосфери навколо вибраного іону, що пояснюється неправильною фізичною постановкою задачі, яка не узгоджується з експериментальними даними. Відкрита в цій роботі кореляція енергій гідратації іонів з відповідними енергіями іонізації ясно показує, що дана задача є суцільно квантова і для неї незастосовний класичний статистичний підхід.

Висновки

На відміну від великої кількості робіт, в яких розчини електролітів розглядаються в рамках класичної фізики, в даній роботі вперше розглядаються невідомі раніше квантові закономірності для водних розчинів електролітів.

1. Квантові властивості розчинів перш за все проявляються у взаємозв'язку розчинності речовин з їх температурами плавлення T_m , бо плавлення є нелінійно-квантовим явищем, яке не має класичного лінійного аналогу. При зменшенні величини T_m розчинність речовин зростає. Для багатьох кристалів розчинність зростає при підвищенні температури, а для ряду речовин, наприклад, NaOH , KOH , LiClO_4 , NH_4NO_3 і др. крива розчинності закінчується в точці плавлення. В останньому випадку концентрація розчину досягає 100%, а вміст води зменшується до нуля.

2. Незастосовність класичного підходу до рідин зумовлена тим, що в результаті сильної фонон-електронної взаємодії, тепловий рух атомів нерозривно пов'язаний з квантовою поведінкою електронної підсистеми. На відміну від явищ надплинності і надпровідності квантові властивості звичайних рідин і розчинів проявляються при високих температурах.

3. Встановлено, що енергії гідратації катіонів і аніонів в розрахунку на один іон визначаються енергіями іонізації відповідних атомів для отримання вільних іонів. В розчинах відбувається трансформація іонів при утворенні хімічних зв'язків з молекулами води і вбудовуванні їх в структуру води. Шляхом перерозподілу електронної густини і зміщень протонів заряди іонів розподіляються по значній просторовій області, подібній до атмосфери іонів в теорії Дебая-Хюккеля. Таким чином, орієнтаційна поляризація диполів води в сильному полі іонів при

класичному підході замінюється квантово-хімічною поляризацією при квантовому підході.

4. Явище електролітичної дисоціації електролітів зумовлено особливими квантовими властивостями розчинника, в яких завдяки відсутності далекого порядку, стійкого при низьких температурах, можливе утворення більш сильних типів локальних зв'язків при зменшенні середньої енергії зв'язків. І ці зв'язки в розчинниках виявляються більш сильними в порівнянні з хімічними зв'язками в кристалах, що розчинюються, що і приводить до дисоціації речовини на іони. Зв'язок розчинності з температурами плавлення речовин неспростовно вказує на квантову природу процесів розчинення і електролітичної дисоціації. З ростом температури просторово однорідне впорядкування речовини змінюється більш складним неоднорідним впорядкуванням.

5. Розглянутий історичний розвиток ідей в фізиці некристалічного стану речовини показує, що взаємоузгоджений розвиток загальних квантових уявлень для широкого кола макроскопічних явищ більш важливий в порівнянні зі спробами формального кількісного опису певних процесів без розуміння їх суті.

Попередньо проведені дослідження [12,18,19] і отримані в даній роботі результати дозволяють говорити про нову нелінійно-квантову концепцію конденсованого стану речовини і розвиток нової науки – нелінійно-квантової макрофізики.

Список використаної літератури

1. Воронов В.К., Подоплелов А.В. Современная физика. –М.: URSS, 2005.- 512 с.
2. Корнієнко М.Є. Низькочастотні колективні моди системи водневих зв'язків води//УФЖ-2002.- Т.47, № 4 - С.361-364.
3. Корнієнко М.Є. Спостереження поздовжньо-поперечного розщеплення в спектрах комбінаційного розсіяння рідкого хлороформу// УФЖ- 2001-Т.46, № 5-6, С.546-552.
4. Корниенко Н.Е., Малый В.И., Понежа Г.В., Понежа Е.А. Природа частотно-угловой структуры излучения при ВКР в жидкостях// Доклады АН УРСР, сер. А.- 1983.- № 4.- С.65-68.
5. Корниенко Н.Е., Малый В.И., Понежа Г.В., Понежа Е.А. Антистоксово комбинационное рассеяние на поляритонах в жидкости, индуцированное ВКР// Оптика и спектроскопия-1986.- Т.60, № 6.- С.1171-1174.
5. Корниенко Н.Е., Малый В.И., Понежа Г.В. Генерация возбужденных колебательных состояний при ВКР и поляритонный механизм релаксации в жидкостях//Опт. и спектроск.-1986.-Т.61, №1.-С.174-177.
6. Корниенко Н.Е., Малый В.И., Понежа Г.В., Федорченко А.М. Тонкая структура и аномальное уширение спектров при вынужденном

- комбинационном рассеянии// Сб. "Физика жидкого состояния", Киев.- 1986.- вып.14.- С. 41-54.
7. Корниенко Н.Е., О продольно-поперечном расщеплении и коллективном характере колебательных возбуждений в жидкостях и аморфных средах// Сб. "Физика жидкого состояния", Киев, 1989, вып.17.
8. Корниенко Н.Е., Гайдук В.Ф., Малый В.И., Понежа Г.В., Возбуждение обертонов колебательных возбуждений при вынужденном комбинационном рассеянии в самофокусирующих жидкостях, поляритонный механизм релаксации и измерение анизотропии колебаний// Сб. научных трудов, Оптическая спектроскопия.- Киев, АН Украины, Ин-т физики, 1993.- С. 171-176.
9. Денисов В.Н., Маврин Б.Н., Подобедов В.Б., Стерин Х.Е. Гиперкомбинационное рассеяние на поляритонах в четыреххлористом углероде// Письма в ЖЭТФ – 1982. - Т. 35, вып. 8.-С. 312-314.
10. Денисов В.Н., Маврин Б.Н., Подобедов В.Б., Стерин Х.Е. Гиперкомбинационное рассеяние и правила отбора по волновому вектору и матричному элементу в колебательных спектрах стекол и жидкости// ЖЭТФ -1983.- т. 84, вып. 4.- С.1266-1278.
11. Корнієнко М.Є., Круть О.В. Спостереження ґраткових мод рідкого CS_2 в області сумарних коливальних смуг ІЧ поглинання// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки.- 2005.- вип. № 1.- С. 345-357.
12. Корнієнко М.Є. Про зв'язок теплот плавлення кристалів з енергіями оптичних фононів // Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки.- 2004.- вип. № 4.-С.466-476.
13. Корнієнко М.Є., Про фонону дискретність теплот кипіння// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки. – 2005. - №3.-С. 520-534.
14. Корниенко Н.Е., Фононная дискретность теплот плавления молекулярных, ковалентных и ионных кристаллов// Международная конференция ФТТ-2005, Актуальные проблемы физики твердого тела, 26-28.10.2005, Минск.С.319-321.
15. Корнієнко М.Є., Про колективну природу теплопровідності води і деяких інших рідин// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки.- 2005, вип. № 4.-С.511-519.
16. Корнієнко М.Є. Колективні властивості теплопровідності рідин. 1. Резонансні властивості теплопровідності води і водних розчинів// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки. – 2005. - №4.-С.372-384.
17. Корнієнко М.Є. Зв'язок температурного максимуму швидкості звуку в воді з колективними коливальними модами// Вісник Київського університету, Серія: фізико-математичні науки. – 2006. - №1, с.

18. Korniyenko N.E., Conception of nonlinear wave's interaction in physics and spectroscopy of the condensed media// XVII Intern. Schol-Semin. "Spectroscopy of Molecules and Crystals", 20-26.09 2005, Beregove, Cremea, Ukraine, Abstracts, p.18.
19. Korniyenko N.E., New conception of ion hydration in water solutions// Abstracts of 5-th Int.Conf. "Problem of Optics and High Techn. Mater. Sci.", Kiev, 2004, p.208.
20. Самойлов О.Я. Структура водных растворов и гидратация ионов.- М.: 1957.-182 с.
21. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии.- М.: Мир, 1991.- 763 с.
22. Вальден П.И. Теория растворов в их исторической последовательности. Пер Н.П.Страхова под ред. М.А.Блох, ИХТИ.- 1921.- с.150.
23. Менделеев Д.И. Исследование водных растворов по удельному весу (с.564), Сб. Растворы, Изд. АН СССР.- 1959.- 1163 с.
24. Менделеев Д.И. Основы химии,.-Изд. 8, СПб.- 1905.- С.437.
25. Золотарева В.М., Морозов В.Н., Смирнова Е.Б. Оптические постоянные природных и технических сред - Л.: Химия.- 1984.- 215 с.
26. Kornienko N.E., Loutsenko O.V., Change of Frequencies of TO and LO Modes of System of hydrogen Bundles of Water in the sated Solutions of Salts, Proceedings of the XV International School-Seminar "Spectroscopy of Molecules and Crystals", 23-30 June 2001, Chernihiv, Ukraine, p.151.
27. Bilyi M.U., Kornienko N.E., Loutsenko O.V., Research of strenghtening and easing of a hydrogen Bonds Grid in Water Solutions with molecular Kations and Anions, там же, p.152.
28. Коган В.Б., Фридман В.М., Кафаров В.В., Справочник по растворимости, т.1, Бинарные системы, М.-Л.: ФР СССР, 960 с.
29. Киргинцев А.Н., Трушников Л.Н., Лаврентьева В.Г., Растворимость неорганических веществ в воде, Л., Химия, 1972, 248 с.
30. Цундель Г. Гидратация и межмолекулярное взаимодействие, М.: Мир, 1972, 404 с.
31. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике, М.: Наука, 1978, 278 с.
32. Зайцев И.Д., Асеев Г.Г. Физико-химические свойства бинарных и многокомпонентных растворов неорганических веществ, Справочник, М.: Химия, 1988, 415 с.
33. Дебай П. Избранные труды. Статьи 1909-1965 г. -Л.: Наука,-1987.-559 С. Статья Дебая П., Хюккеля Э. К теории электролитов. 1. Понижение точки замерзания и родственные явления, -С.163-202.

Надійшла до редколегії 12.10.99

УДК 534

Курилюк* В.В., аспірант
Горб А.М., к. фіз.-мат. н., м.н.с.
Половина О.І., к. фіз.-мат. н., м.н.с.
Коротченков О.О., проф.

Електропружні коливання тривимірних прямокутних пластин-резонаторів LiNbO_3

Теоретично та експериментально проаналізовано електропружні коливання тривимірних прямокутних пластин-резонаторів LiNbO_3 при електричному збудженні. За допомогою варіаційного методу Релея-Рітца розраховано спектр власних частот та форми коливань резонатора. Теоретичні результати добре узгоджуються із отриманими експериментальними даними для пластин X-зрізу.

Ключові слова: коливання, п'єзоелектричний резонатор, ніобат літію.

V. V. Kuryluk, Postgr. St.
A. M. Gorb, PhD
O. I. Polovina, PhD
O. A. Korotchenkov, Prof.

Electroelastic vibrations of three-dimensional rectangular LiNbO_3 plate-resonators

Electrically-excited electroelastic vibrations of three-dimensional rectangular LiNbO_3 plate-resonators have been analyzed both theoretically and experimentally. Using the Rayleigh-Ritz variational method the eigenfrequency spectra and related mode shapes were calculated. The theoretical and experimental results ones obtained with X-cut plates are shown to be in a good agreement.

Key Words: vibration, piezoelectric resonator, lithium niobate.

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

П'єзоелементи LiNbO_3 є основою електромеханічних датчиків, ультразвукових перетворювачів, акустоелектронних приладів на поверхневих акустичних хвилях і ін. Характеристики зазначених приладів визначаються не лише матеріальними параметрами п'єзоелектрика, але й особливостями розподілів пружних та п'єзоелектричних полів на його поверхні. Тому вивчення коливальних характеристик п'єзоелементів залишається актуальною задачею фізичної акустики.

Дослідження розподілів пружних та п'єзоелектричних полів на поверхні п'єзоелементів ведуться як експериментальними так і теоретичними методами [1]. Слід відмітити, що задача про коливання тривимірного п'єзоелектричного тіла не має точного аналітичного розв'язку, тому її теоретичний розгляд пов'язаний із використанням наближених методів, серед яких – варіаційний метод Релея – Рітца та метод скінчених елементів [2-3].

В даній роботі проведено теоретичне та експериментальне дослідження коливальних характеристик п'єзоелектричного резонатора

LiNbO_3 X-зрізу. За допомогою варіаційного методу Релея-Рітца [2] чисельно розраховано власні частоти коливань тривимірного прямокутного п'єзореzonатора та розподіли пружних зміщень на його поверхні (форми коливань) на цих частотах. Теоретичні результати співставлено із експериментальними даними, показано їх якісне узгодження.

Експериментально, власні частоти коливань визначались із виміряних частотних залежностей модуля $|\dot{Y}|$ комплексної електричної провідності резонаторів. Вимірювання залежностей $|\dot{Y}(f)|$ проводилось за стандартною методикою [4]. Типові результати вимірювань, отримані на зразку LiNbO_3 LNO-10 з лінійними розмірами $(L_x, L_y, L_z) = (0.74, 13, 19)$ мм із повністю металізованими гранями $x=0$ та $x=L_x$, наведено на рис. 1. Теоретично розраховані значення власних частот коливань досліджуваного зразка, які зображено на рис. 1 під експериментальною кривою, в цілому непогано узгоджуються із експериментальними даними. Наявна розбіжність між виміряними та розрахованими значеннями власних частот пов'язана, з одного боку, із похибкою самого чисельного методу (відомо, [5], що варіаційний метод розрахунку дає дещо завищені значення для власних частот у порівнянні з експериментально виміряними). Іншою причиною розбіжності є деяка неоднорідність лінійних розмірів резонатора, що не враховується при розрахунках.

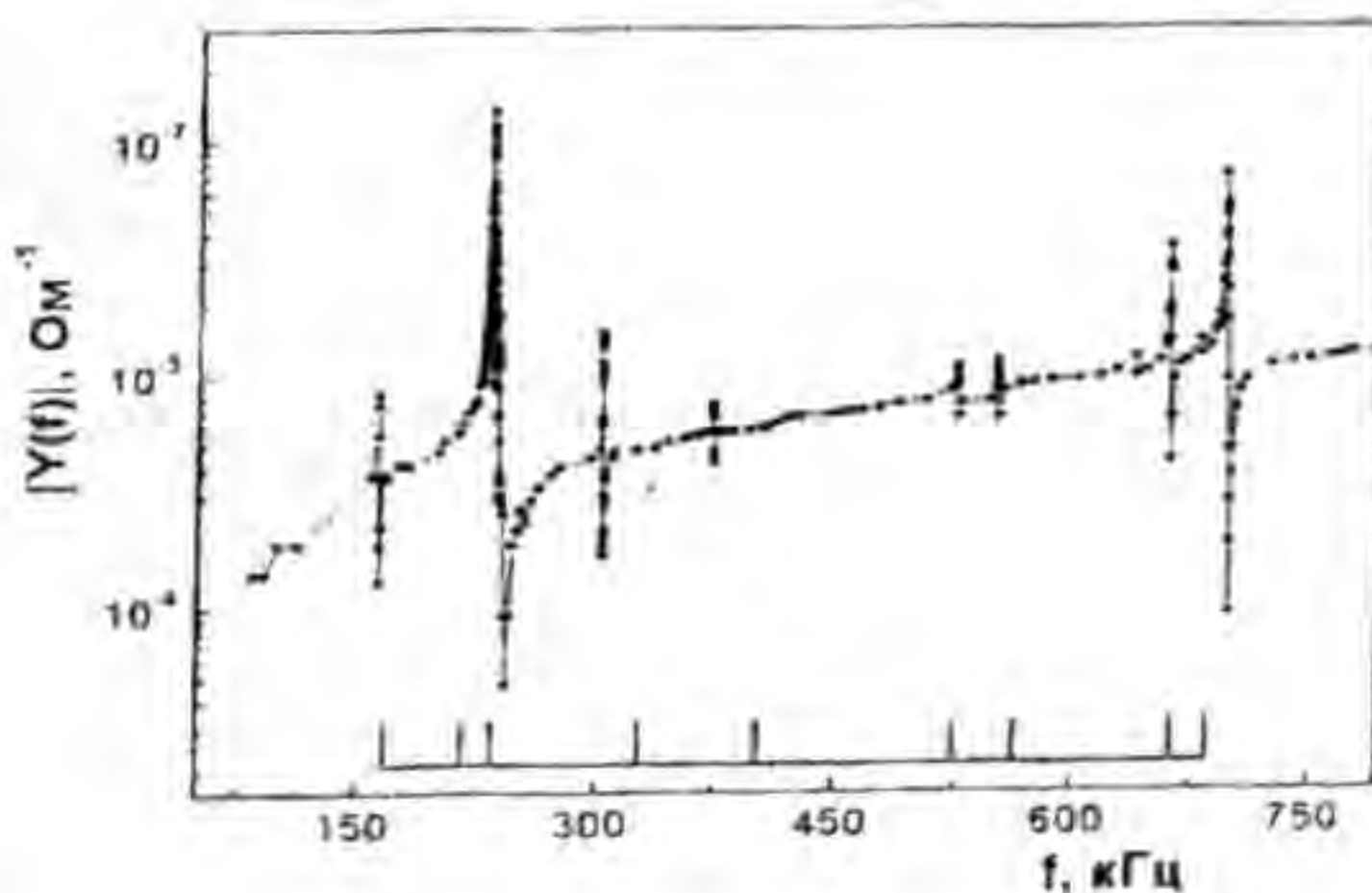


Рис. 1 Частотна залежність модуля повної електричної провідності зразка LNO-10 (суцільна крива). Теоретично розраховані частоти коливань наведено під кривою.

Поряд з обчисленням власних частот досліджуваного зразка (рис. 1), для цих частот проводилося також обчислення розподілів пружного поля (поля пружних зміщень) по його поверхні. Компоненти (U_x, U_y, U_z) вектора пружних зміщень розраховувались як розв'язання по відповідних базисних функціях $BF_{x,y,zn}$.

$$U_i(x, y, z) = \sum_{n=1}^N A_{in} \cdot BF_n(x, y, z), i = x, y, z$$

де A_{in} – коефіцієнти розвинення, які отримуються шляхом варіації функціоналу Φ , побудованого для опису електропружних коливань обмежених п'єзоелектричних тіл, N – число базисних функцій в розвиненнях (в даній роботі $N = 33$). Базисні функції BF_n та функціонал Φ вибирались аналогічно до тих, що використовувались в роботі [6].

На рис. 2 для найнижчої власної частоти ($f = 163$ кГц) пластини-резонатора LNO-10 представлено результати розрахунків розподілу модуля вектора пружних зміщень

$$U(L_x, y, z) = \sqrt{U_x^2(L_x, y, z) + U_y^2(L_x, y, z) + U_z^2(L_x, y, z)}$$

на поверхні $x = L_x$ в різні моменти часу (часова залежність вектора зміщень в розрахунках приймалась пропорційною $\cos(\omega t)$). Як видно з рис. 2, в початковий момент часу ($t=0$) область мінімальної амплітуди $U(L_x, y, z)$ пружного поля знаходиться посередині поверхні пластини (рис. 2а). З часом відбувається перерозподіл пружних зміщень, що веде до збільшення величини $U(L_x, y, z)$ у центрі та її зменшення на краях поверхні пластини-резонатора (у відповідності з прийнятою часовою залежністю) – рис. 2б

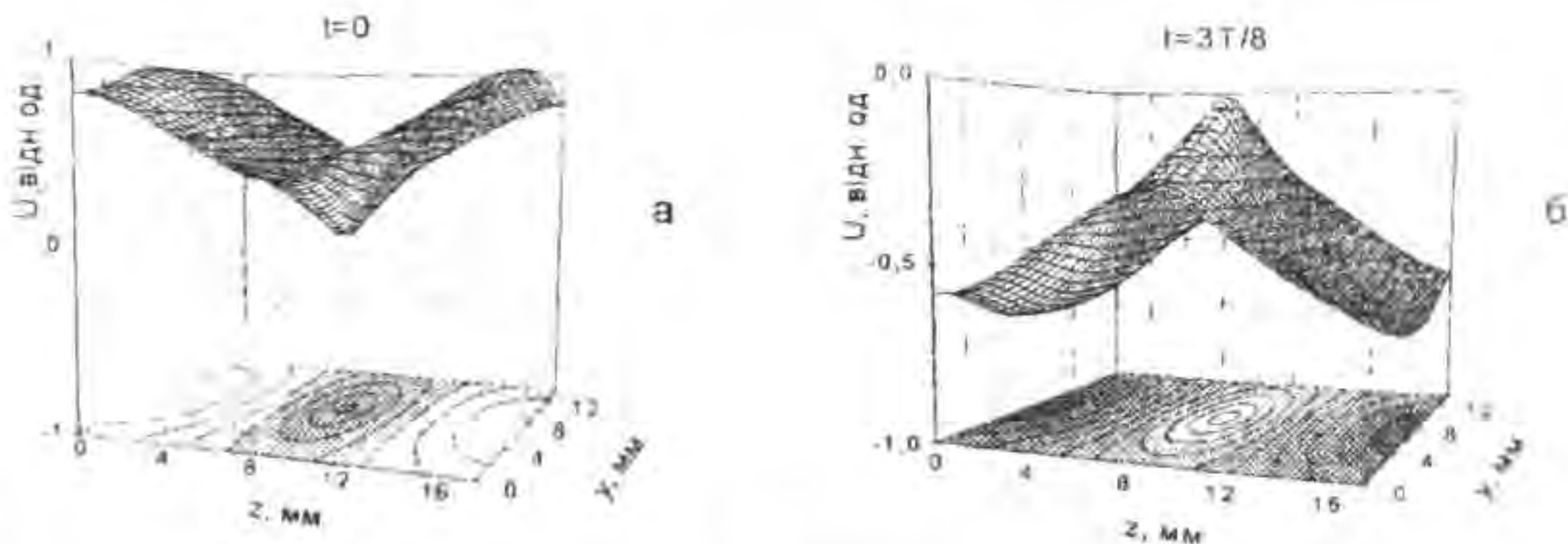


Рис. 2 Часова залежність розподілу поля пружних зміщень $U(L_x, y, z)$ на поверхні зразка LNO-10 на частоті $f = 163$ кГц: а – $t = 0$, б – $t = 3T/8$, де $T = 1/f$ – період коливань.

Експериментальна перевірка результатів чисельних розрахунків проводилася за відомою методикою реєстрації фігур Хладні [7]. В експериментах на частотах власних коливань зразків спостерігався перерозподіл частинок ZnS, які наносилися тонким шаром на поверхню зразка. На рис. 3 показано одну з фігур Хладні, що відповідає резонансній частоті $f = 163$ кГц для зразка LNO-10. Видно, що ця фігура якісно узгоджується із теоретично розрахованим розподілом $U(L_x, y, z)$. Дійсно, усереднення коливань у часі (рис. 2) призведе до того, що певна частина порошку, який знаходиться на поверхні зразка, сконцентрується в її

центральної частині, а інша частина - на краях, що й ілюструє експериментальний розподіл (рис. 3).

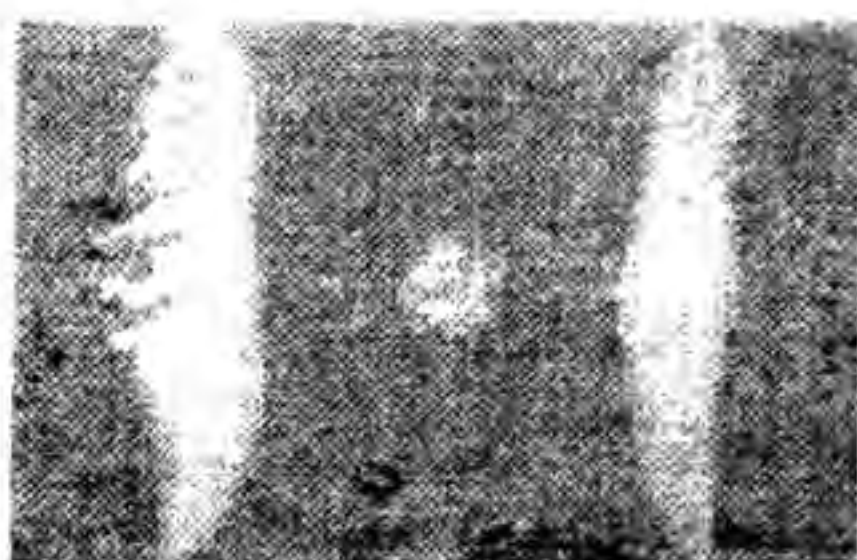


Рис. 3 Фігура Хладні, отримана на резонансній частоті $f = 163$ кГц для зразка LNO-10.

Таким чином, в роботі проведено теоретичні розрахунки власних частот коливань п'єзоелектричної пластини-резонатора LiNbO_3 прямокутної форми та відповідних розподілів пружних зміщень на його поверхні. Результати теоретичних розрахунків якісно узгоджуються з даними експериментальних вимірювань цих коливальних характеристик.

Література

1. Chi-Hung Huang, Chien-Ching Ma. Experimental and numerical investigations of resonant vibration characteristics for piezoceramic plates // J. Acoust. Soc. Amer. – 2001. – Vol. 109, – № 6. – P. 2780 – 2788.
2. Holland R., Eer Nisse E. Variational evaluation of admittances of multielectroded three-dimensional piezoelectric structures // IEEE Trans. Sonics and Ultrasonics. – 1968. – Vol. 15. – P. 119 – 132.
3. Lerch R. Simulation of piezoelectric devices by two- and three-dimensional finite elements // IEEE Trans. on Ultrasonics, Ferroelectrics and Frequency Control. – 1990 – Vol. 37, – № 3. – P. 233 – 247.
4. Горб А., Надточій А., Половина О., Коротченков О. Стимульований ультразвуком перенос заряду у квантових ямах GaAs/AlGaAs // Журн. Фіз. Досл. – 2003. – Т. 7, – №3. – P. 353 – 356.
5. Ректорис К. Вариационные методы в математической физике и технике. М.: Мир, 1985. – 590 с.
6. Polovina O. I., Kurylyuk V. V., Korotchenkov O. A. Variational computation of a vibrating lithium niobate rectangular plate // cond-mat/0604337.
7. Ikushima H., Ohji K. Observation of Chladni figures in piezoelectric ceramic plates of rectangular form // Jpn. J. Appl. Phys. – 1974. – Vol. 13. – P. 20 – 33.

Надійшло до редакції 18.04.2006

УДК 669.14.018.298:781

Микола М. Новиков,
Ірина М. Спиридонова,
Олена Ю. Береза

Роль концентраційного поля за умов евтектичної кристалізації

Авторами роботи проведений аналіз процесів атомної кооперації при рості кристалів двох різних фаз під час евтектичної кристалізації. Запропоновано модель зміни концентраційних полів фаз, що зростають, відповідно до якої процеси атомної кооперації розпочинаються в момент перекриття полів. Ступінь атомної кооперації пропонується оцінювати через різницю між концентрацією розплава і ефективною концентрацією домішки.

Ключові слова: евтектична кристалізація, концентраційне поле

Nikolay N. Novikov,
Irina M. Spiridonova,
Olena Yu. Bereza

Role of concentrate field in case of eutectic crystallization

The analysis of the atomic cooperation processes under the two different crystals growth during eutectic crystallization was done of the authors of the work. The modal of changing concentrate fields of growing phases was suggested. According to this model at the moment of overlapping of these fields the processes of the atomic cooperation begins. The difference between alloy concentration and effective addition concentration was suggested as a degree of atomic cooperation.

Key Words: eutectic crystallization, concentrate field

*E-mail: novikov@univ.kiev.ua odm@ff.dsu.dp.ua info@dsau.dp.ua

Евтектичні сплави відіграють важливу роль серед сучасних конструкційних та інструментальних матеріалів. Саме це підтверджує актуальність дослідження механізмів формування їх внутрішньої будови і, таким чином, дозволяє керувати властивостями сплавів. Але, незважаючи на чисельність праць, присвячених сплавам зазначеного типу, залишається невирішеним до кінця питання про механізми кооперації фаз під час евтектичного перетворення. Ця проблема охоплює велике коло питань, пов'язаних не тільки з механізмами

двофазного росту під час самої евтектичної кристалізації, а і передкристалізаційними процесами, що відбуваються в рідкій фазі.

При вивченні фазових переходів розпаду, до яких належить і евтектичне перетворення, особливого значення набувають дослідження будови рідини при розгляді її тонкого шару, який безпосередньо контактує з твердою фазою. На думку авторів [1, 2] різниця в експериментально визначених і підрахованих теоретично швидкостей росту кристалів з розплаву зумовлена, в основному, неврахуванням в існуючих теоріях росту приповерхневого шару рідини, що існує між кристалом і розплавом. В той же час за умов нестационарних процесів фазових перетворень роль цього фактора значно зростає. Дійсно, значна увага приділяється дослідженню твердої поверхні межі розділу й дуже мало – рідкій фазі [1,3, 4], що пояснюється методичною складністю й неможливістю безпосередньо спостерігати будову цього шару. Саме через це велике значення мають аналітичні дослідження за допомогою модельних експериментів. Наприклад, встановлено, що у приповерхневому шарі рідина впорядковується у вигляді суперпозицій дискретного набору хвиль густини, які асимптотично стухають при віддаленні від поверхні на атомних довжинах, які виражаються через структурний фактор об'ємної рідини. Асимптотика збурень визначається впорядкуванням у вигляді квазісметичних атомних шарів, які є паралельними поверхні. Експериментально було доведено, що і властивості тонкого шару розплаву також значно відрізняються від властивостей в об'ємі рідкої фази. Наприклад, це стосується коефіцієнту переломлення світла, виникнення явища розсіювання світла від міжфазної межі, яке значно перебільшує рівень фону [1].

Значні переохолодження, спричиняючи нестационарність процесів, завдають певний вплив на будову й підвищують роль рідинного прошарку на межі кристал-рідина. Процеси самоорганізації в цій зоні спрямовуються на кооперативний рух атомів і виникнення впорядкованих дисипативних структур. Нестационарні умови в даному випадку створюються через неоднорідне охолодження розплаву, коли в тонкому приповерхневому шарі виникає різниця температур (переохолодження) внаслідок різниці температур твердої й матричної рідкої

фази. При невеликих значеннях переохолодження нижче деякого критичного значення $\Delta T < \Delta T_{кр}$ відведення тепла з нижньої частини призводить до того, що нагріта у нижній частині рідина піднімається доверху внаслідок теплопровідності й рідина залишається нерухомою. Але коли ступінь переохолодження перевищує критичне значення $\Delta T > \Delta T_{кр}$ в рідині починається конвекція: холодна рідина опускається донизу, в той час як нагріта піднімається вгору. Розподіл цих двох протилежно спрямованих потоків є самоорганізованим, в результаті чого виникає дисипативна структура. На рис.1 надано залежність повного теплового потоку Q в одиницю часу від нагрітої (нижньої) до холодної (верхньої) поверхні від переохолодження ΔT . При $\Delta T < \Delta T_{кр}$ рідина знаходиться в спокої і перенесення тепла відбувається шляхом звичайної теплопередачі. При $\Delta T > \Delta T_{кр}$ стан нерухомої теплопровідної рідини стає нестійким (пунктирна лінія), бо при значному переохолодженні рідина, яка знаходиться в спокої, вже не може забезпечити перенесення зростаючої кількості теплоти й встановлюється новий конвекційний режим. Таким чином, відбувається кінетичний фазовий перехід в нерівноважній системі і при переході від докритичного до надкритичного режиму спонтанно змінюється симетрія системи, що є аналогічним до термодинамічних фазових переходів. В даному випадку настає стійкий режим у вигляді шестигутних конвекційних комірок Бенара. Слід зауважити, що саме створення



Рис.1. Критичне переохолодження для утворення коміркової будови рідкого прошарку.

гексагональних комірок в тонкому приповерхневому шарі рідини спричиняє особливості комірчаної будови фронту евтектичної кристалізації, що було підтверджено багатьма дослідженнями [5,6]. Відповідно до наданих уявлень, в тонкому шарі розплава виникають теплові потоки, внаслідок чого перед фронтом кристалізації в розплаві виникають мікрозони з різною температурою. В тих мікрозонах, де тепловий потік буде спрямований від рідкої матричної фази, яка має високу температуру, до холодної твердої фази, температура буде підвищеною. В той же час в тих мікроділянках, де тепловий потік буде спрямований від твердої фази до рідкої, навпроти, температура буде значно нижчою. Таким чином, в тонкому рідкому прошарку перед фронтом кристалізації виникають значно переохолоджені мікрозони, де і стимулюються кристалізаційні процеси. Періодичність цих мікрозон та їх шестигрунтова форма визначають форму фронту кристалізації, який так само має комірчану будову. Теплові потоки спричиняють і бокові дифузійні потоки, що призводить до сегрегації домішки. В результаті відбувається збагачення межі комірки на домішку, в той час як центр комірки збіднюється на неї, що було підтверджено результатами експериментів. Існування критичного стану, при якому плоский фронт кристалізації перетворюється на комірчаний, було експериментально доведено в роботі [7].

Сама подальша евтектична кристалізація може здійснюватись двома шляхами, одним з яких є колоніальний ріст кристалів евтектичних фаз з утворенням бікристалітних конструкцій, що є досить поширеним типом евтектичної морфології. Іншим шляхом є конгломератний ріст, тобто роздільна кристалізація евтектичних партнерів. Однак закономірності процесів атомної самоорганізації і кооперації при рості кристалів під час евтектичної кристалізації до цього часу не встановлено.

При дослідженні механізмів атомної кооперації при евтектичній кристалізації запропоновано модель зміни концентраційного поля навколо кристала, що зростає. Відповідно до атомної моделі процесу росту кристалів двох різних фаз α і β у розплаві, зростання кристала фази α супроводжується

збідненням оточуючого розплава компонентом А та пересиченням компонентом В внаслідок відтіснення його з фронту кристалізації (рис.2).

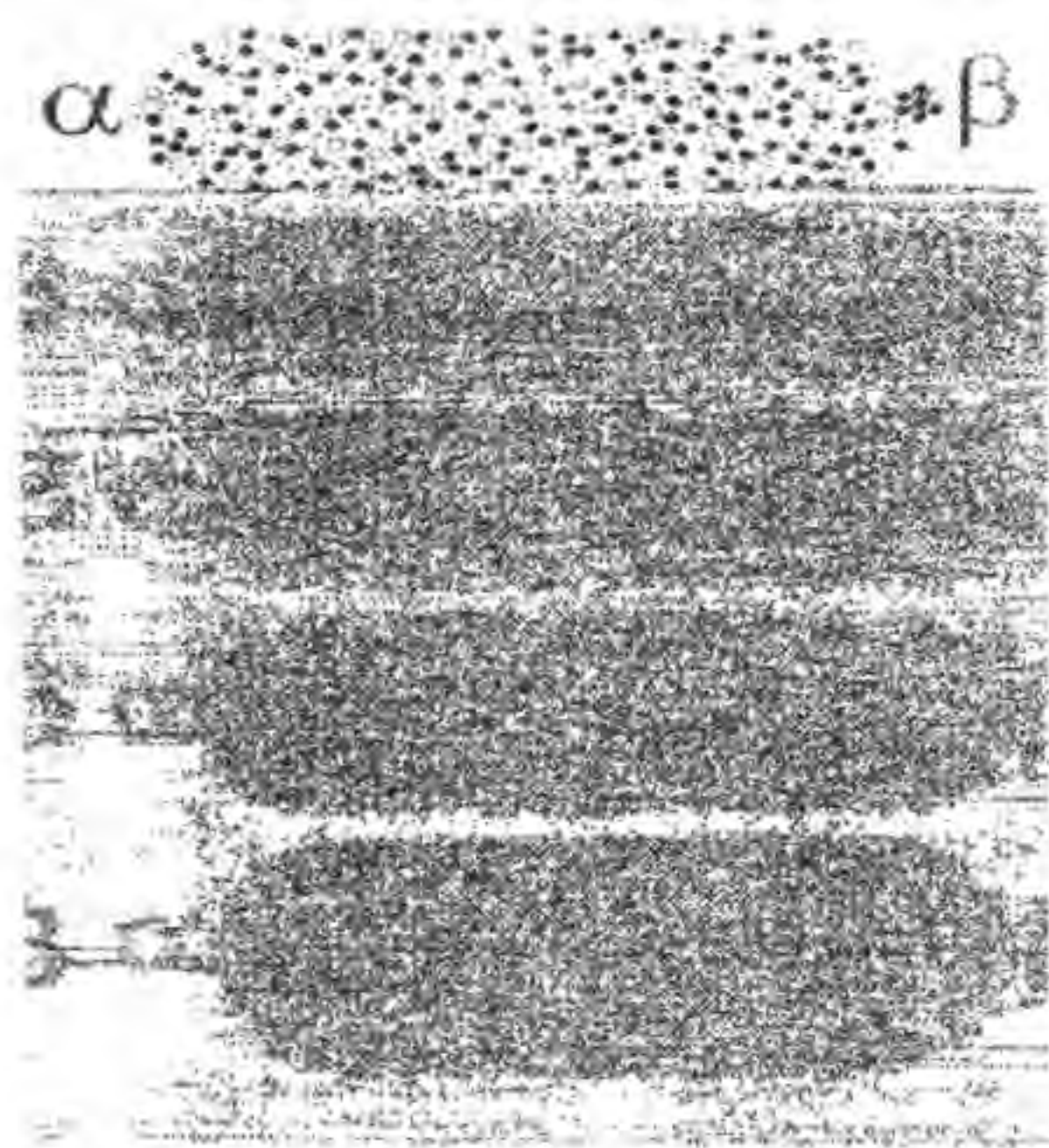


Рис.2. Атомна модель процесу росту кристалів
двох різних фаз в розплаві

При розробці моделі запропоновано:

1. Описувати розподіл концентрацій основного компонента А поблизу фази α і компонента В поблизу фази β залежністю І.В.Саллі [4]:

$$C_L = A \cdot \exp(-kr/r_1) + B,$$

де: А і В – сталі, k – рівноважний коефіцієнт розподілу; r – товщина концентраційної зони (“подвір’я кристалізації”); r_1 – радіус кристала.

2. Описувати відтіснення домішки В з фронту кристалізації поблизу фази α і домішки А поблизу фази β залежністю В.А.Тілера [7]:

$$C_L = C_E \cdot [(1-k)/k] \cdot \exp(-Ry/D) + C_E,$$

де: C_L – концентрація домішки, C_E – евтектична концентрація, k – коефіцієнт розподілу, D – коефіцієнт дифузії, R – швидкість кристалізації, y – товщина концентраційної зони.

Результати розрахунків відповідно до наведених залежностей дозволили побудувати модель, наведену на рис.3, для випадку, коли співвідношення між твердими фазами евтектики приблизно рівне. Відповідно до запропонованої моделі навколо кожного з кристалів існує концентраційне поле або, так зване,

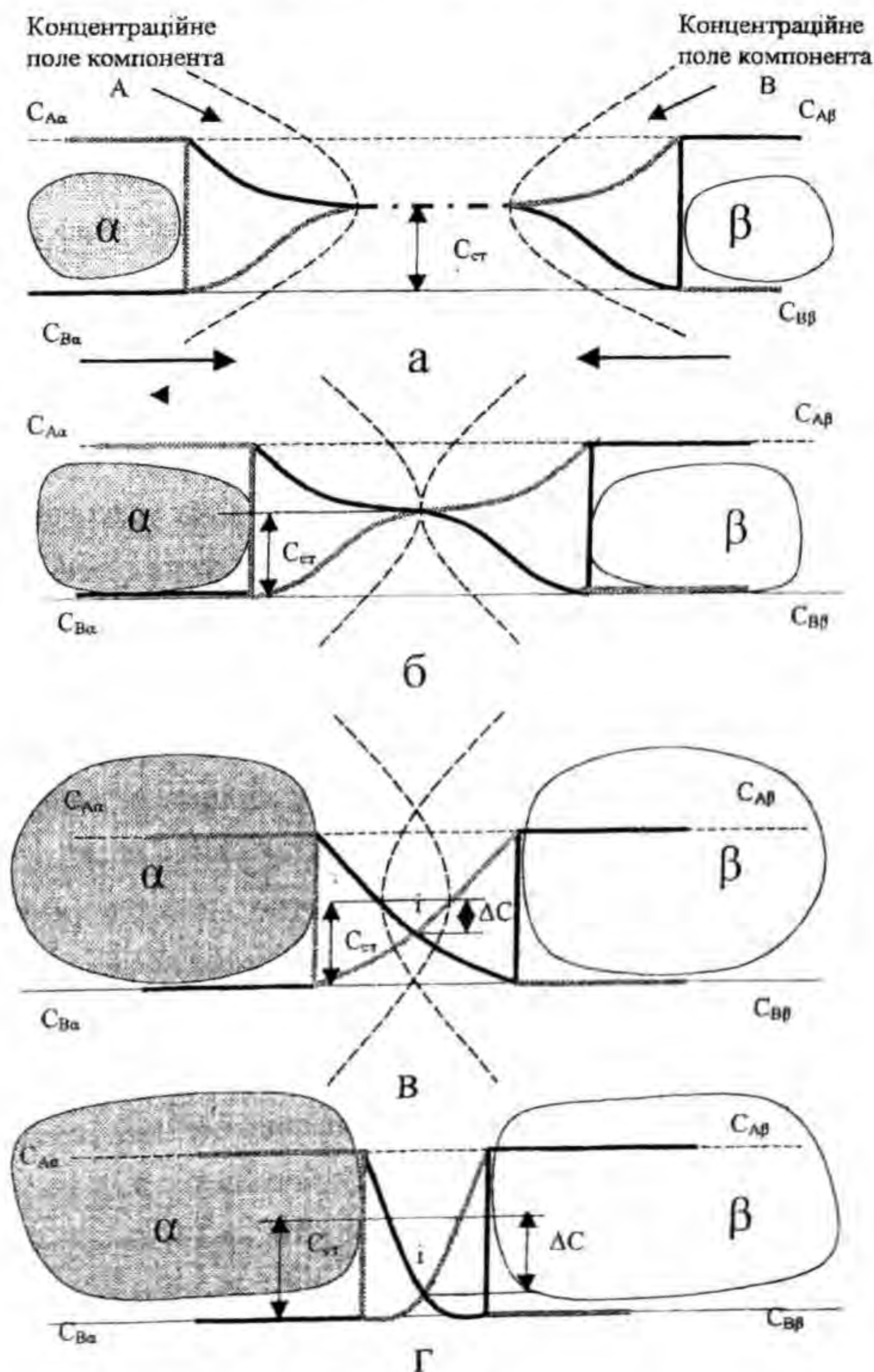


Рис.3. Модель росту кристалів фаз α і β з розплава.

“подвір’я кристалізації” [4]. Спочатку між концентраційними полями фаз існує прошарок із статистичним розподілом атомів обох елементів $C_{ст}$ (рис.3,а). При цьому на рисунку лінії сірого кольору показують зміну кількості елемента А (як основного елемента $C_{A\alpha}$ біля кристала α і як домішки $C_{A\beta}$ біля кристала β), а чорні – зміну кількості елемента В (як основного елемента $C_{B\beta}$ біля кристала β і як домішки $C_{B\alpha}$ біля кристала α). Критичним є момент зіткнення концентраційних полів фаз (рис.3,б). Процеси атомної кооперації розпочинаються в момент початку перекриття концентраційних полів, коли з’являється різниця концентрацій $\Delta C = C_{ст} - C_i$, де C_i - ефективна концентрація домішки в момент, коли $C_{A\beta} = C_{B\alpha}$. Величину ΔC пропонується вважати як ступінь атомної кооперації при парному рості кристалів двох різних фаз. В зоні перекриття полів виникає тонкий прошарок, збіднений з обох боків від центру на відповідний елемент: А з боку кристалів α (ліворуч від точки і на рис.3,в і г) і В з боку кристалів β (праворуч від точки і на рис.3,в і г). Під час зростання кристала α ця збіднена на атоми А зона звужується. Аналогічним чином поводить себе і протилежна зона, збіднена на атоми В. Внаслідок цих процесів за мірою перекриття концентраційних полів ΔC збільшується зростає від 0 (в момент торкання концентраційних полів) до 1 (в момент зіткнення зростаючих кристалів). Велике значення ΔC свідчить про активну атомну кооперацію в зоні концентраційного поля, тобто відбувається взаємна допомога вже в рідкому стані поблизу зростаючих кристалів.

Висновки. Парний ріст кристалів незалежно від його механізмів передбачає розвиток процесів атомної кооперації на передкристалізаційному етапі, коли перед кожним зростаючим кристалом формується тонкий прошарок рідини із специфічною будовою, де внаслідок конвекційних явищ розвиваються синергетичні процеси, сутність яких полягає у виникненні специфічної комірчастої будови через кінетичний фазовий перехід. Для описання явища атомної кооперації в процесі зростання двох кристалів різних фаз запропоновано модель, відповідно до якої навколо кожного кристала існує концентраційне поле, при перекритті яких виникає певна різниця концентрацій елементів між середньою

концентрацією розплава і ефективною концентрацією домішки, яку пропонується вважати ступенем кооперації. Розроблено залежність ступеня кооперації від перерозподілу концентраційних полів при просуванні фронту кристалізації, починаючи від максимального віддалення кристалів, що зростають, один від одного й до моменту їх контакту, величина якого коливається від 0 до 1.

Список літератури

1. Овсиенко Д.Е. Зарождение и рост кристаллов из расплава: Монография. – К.: Наукова думка, 1994. – 254 с.
2. Салли И.В., Фалькевич Е.С. Управление формой роста кристаллов: Монография. – К.: Наукова думка, 1989. – 160 с.
3. Сомов А.И., Тихоновский М.А. Эвтектические композиции: Монография. – М.: Металлургия, 1975. – 304 с.
4. Салли И.В. Кристаллизация сплавов: Монография. – К.: Наукова думка, 1994. – 239 с.
5. Таран Ю.Н., Мазур В.И. Структура эвтектических сплавов: Монография. – М.: Металлургия, 1978. – 302 с.
6. Р.Эллиот. Управление эвтектическим затвердеванием: Монография. – М.: Металлургия, 1987. – 352 с.
7. Тиллер В.А. Сегрегация растворимых примесей при затвердевании слитка // Жидкие металлы и их затвердевание. – М.: Металлургиздат, 1962. – С. 409-434.

УДК 519.9

Артем О. Подолян¹, Олег О.
Коротченков, Сергій В.
Кондратенко, Роман Г. Чуприна

Вплив ультразвукової обробки на фотолюмінесценцію поруватого кремнію

Експериментально зареєстрований вплив ультразвукової обробки на спектральний склад фотолюмінесценції поруватого кремнію. Наведені дані підтверджують досить складний механізм виникнення фотолюмінесценції на межі "Si кристаліт-аморфна матриця". Висунуте припущення, що ультразвукова обробка здатна впливати на процеси переносу енергії в системі "Si наночастка-аморфна матриця-центр люмінесценції".

Ключові слова: ультразвукова обробка, поруваний кремній, фотолюмінесценція.

¹ E-mail: gogi@univ.kiev.ua

Artem O. Podolian¹, Oleg O.
Korotchenkov, Sergii V.
Kondratenko, Roman G. Chupryna

Influence of ultrasonic treatment on photoluminescence in porous silicon

Ultrasonic treatment is found to affect the spectral shape of the porous Si photoluminescence. The data obtained support a complicated nature of the luminescence mechanism which arises in between the Si crystallites and amorphous matrix. It is suggested that the ultrasonic treatment influences the energy transfer processes between the crystallites and luminescence centers.

Key Words: ultrasonic treatment, porous silicon, photoluminescence.

Наявність видимої люмінесценції поруватого кремнію при кімнатних температурах відкриває широкі перспективи для побудови оптоелектронних приладів, інтегрованих в сучасній кремнійовій мікроелектроніці. Вивченню природи фотолюмінесценції (ФЛ) поруватого кремнію присвячено достатньо багато робіт [1-3]. Але жоден із запропонованих механізмів не пояснює всю сукупність наявних експериментальних фактів щодо природи ФЛ.

В даній роботі вивчено вплив ультразвукової обробки (УЗО) в мегагерцевому (~ 10 МГц) діапазоні частот на спектри ФЛ зразків поруватого кремнію, отриманих при різних умовах.

Досліджувались зразки двох типів, виготовлені методом анодного травлення монокристалічного кремнію. Після виготовлення зразки зберігались в нормальних атмосферних умовах при кімнатній температурі. Люмінесценцію збуджували світлом азотного лазера ЛГІ-21 з довжиною хвилі $\lambda = 337$ нм. Ультразвукові коливання збуджувались п'єзоелектричними перетворювачами, виготовленими з LiNbO_3 зрізу

$Y+36^\circ$, які приклеювались на кремнієву підкладку за допомогою спеціального звукопровідного клею. При цьому у зразках збуджувались хвилі Лемба на резонансній частоті перетворювачів біля 10 МГц.

На рис. 1, а і б наведені спектри фотолюмінесценції двох зразків поруватого кремнію, отримані до, в процесі та після УЗО.

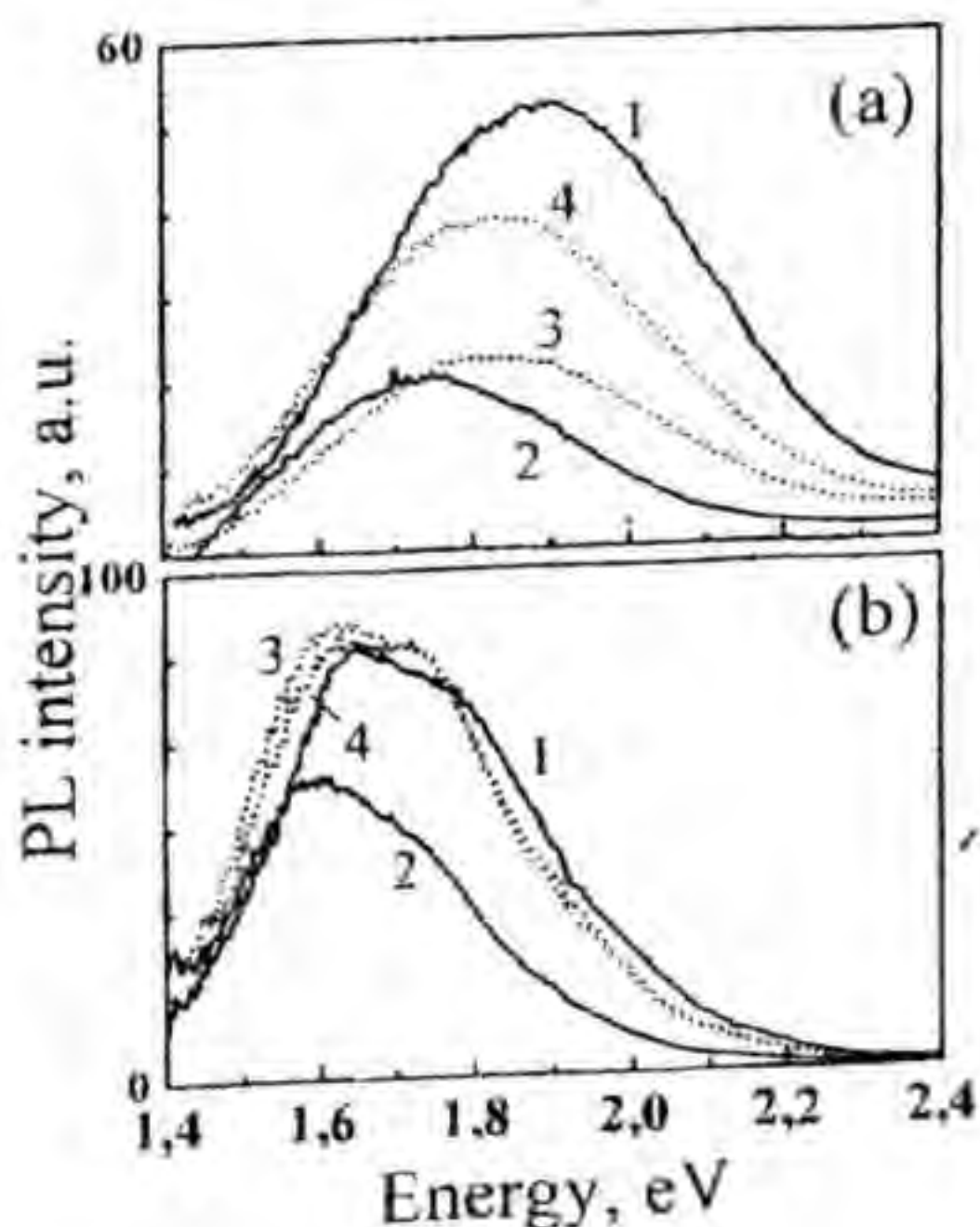


Рис. 1. Спектри ФЛ зразків 1 (а) і 2 (б) до УЗО (1), в момент УЗО при $V=20$ В (2) та їх релаксація після дії УЗО: (а) 3- відразу після УЗО, 4- через 11 діб після УЗО; (б) 3- відразу після УЗО, 4- через 40 хв. після УЗО.

Вихідні спектри фотолюмінесценції обох зразків суттєво відрізняються. Так, смуга люмінесценції зразка 2 асиметрична (спектр 1 на рис. 1,б). На ній можна розрізнити дві компоненти. В той же час, смуга люмінесценції зразка 1 (спектр 1 на рис. 1,а) має більш симетричний вигляд. Окрім того, максимумами на спектрі ФЛ зразка 2 зсунутий у довгохвильовий бік.

Така комбінована структура смуги випромінювання добре пояснюється в моделі двох центрів рекомбінації [3]. При цьому, залежно від властивостей шару SiO_xH_y , можливі три випадки – (1) фотозбудження та випромінювальна рекомбінація електронів і дірок відбувається у наночастках Si, занурених у матрицю SiO_xH_y (процеси 1 на рис. 2,а); (2) фотозбудження відбувається у наночастках Si, електрони і дірки з яких тунелюють на центри люмінесценції у оточуючих наночастках шару SiO_xH_y (процес 2); (3) фотозбудження та випромінювальна рекомбінація електронів і дірок відбувається на центрах люмінесценції (ЦЛ).

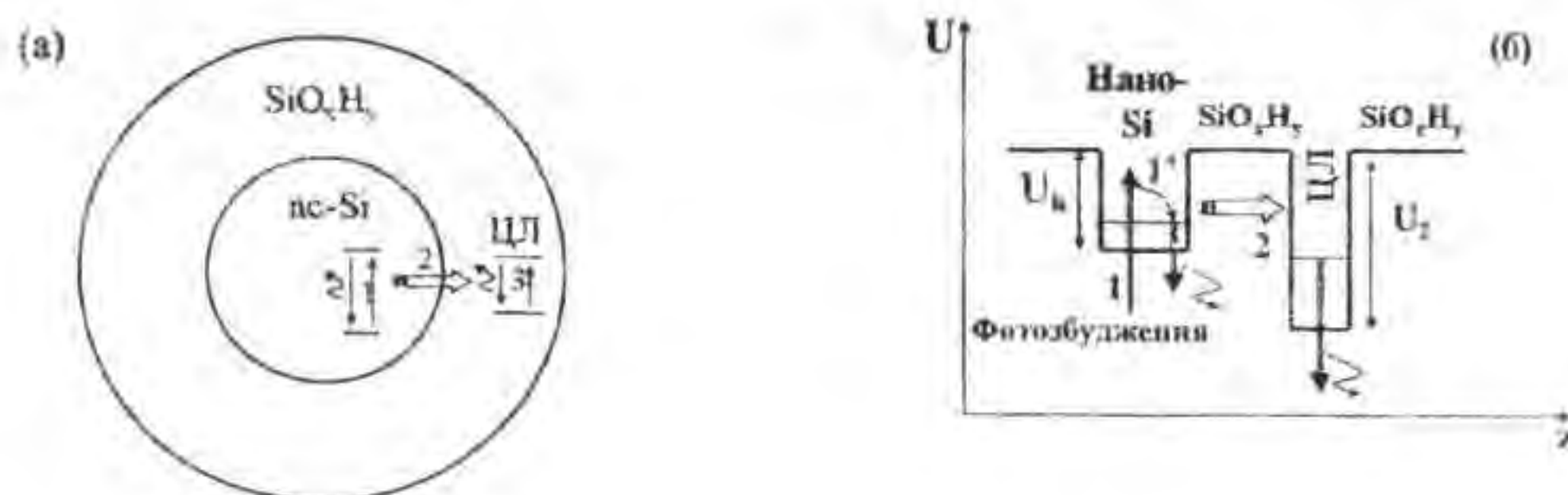


Рис. 2 Схематичне зображення механізму формування ФЛ у поруватому кремнії (а) та енергетична схема для відповідних електронних переходів (б).

розташованих у SiO_2H_x матриці (процеси 3 на рис. 2,а). З'ясовано, що при достатньо великих розмірах наночасток Si домінуючим є випадок (1). Зменшення розмірів призводить до зростання внеску Si-O-H зв'язків із відповідним домінуванням механізму (2). Слід відзначити, що у зразках із гарними випромінювальними властивостями внеском (3) можна нехтувати.

Енергетична схема із зазначеними електронними переходами в рамках механізмів (1) і (2) представлена на рис. 2,б. Фотозбуджений електрон (процес 1) швидко релаксує на основний рівень у Si наночастці (1'), залипаючи відокремленим енергетичним бар'єром U_b від ЦД, який має більш глибокий потенціал (U_2) у порівнянні із Si наночасткою. Відповідно, основний стан у ЦД розташований нижче за енергією (рис. 2,б), формуючи низькоенергетичну складову спектрів на рис. 1 і 2. Тому можна припустити, що в зразку 1 домінують процеси фотозбудження та люмінесценції за механізмом (1), а вихідний спектр ФЛ на рис. 1 значно уширений внаслідок розкиду розмірів Si нанокристалітів. На відміну, у зразку 2 проявляються процеси переносу енергії від Si наночасток до ЦД із появою двох смуг в спектрі ФЛ згідно зазначеним вище механізмам (1) і (2).

Обробка ультразвуком суттєво впливає на ФЛ (спектри 2 на рис. 1,а і б). В процесі УЗО інтегральна інтенсивність ФЛ зменшується, а максимум смуги зміщується в довгохвильову область. Ефект післядії УЗО значно відрізняється у досліджуваних зразках. Так, зареєстровані зміни спектру ФЛ зразка 2 досить швидко зникають (за часи, менші часу запису спектру) – рис. 1,б. На відміну, відразу після припинення УЗО максимум смуги ФЛ зразка 1 дещо зміщується в короткохвильову область, майже не змінюючи своєї інтенсивності (спектр 3 на рис. 1,а). Витримка зразка протягом 11 діб призводить до подальшого зростання інтегральної інтенсивності без помітної зміни положення максимуму смуги. При цьому початкова інтенсивність ФЛ не відновлюється.

Навпаки, для зразка 2 відразу після припинення УЗО ФЛ практично відновлюється (спектр 3 на рис. 2) із деяким зростанням довгохвильової компоненти. Витримка зразка протягом тривалого часу майже не змінює спектр ФЛ.

Такі закономірності можна пояснити в рамках зазначених механізмів ФЛ. Обробка УЗ зразка 1 без достатньої початкової концентрації ЦЛ веде до їх генерації в оточенні Si наночасток із поступовою перебудовою спектру ФЛ у довгохвильову смугу (1 і 2 на рис. 1, а) внаслідок переходу від механізму (1) до механізму (2). Встановлення механізму генерації ЦЛ потребує подальших досліджень. Це може бути як поява ЦЛ при механічному руйнуванні оточення Si наночасток, так і міграція дефектів в область наночасток при дії ультразвуку. Відомо, що ці процеси характеризуються довгими часами відпалу. Відповідно, наведені УЗО зміни спектру ФЛ дуже повільно релаксують, не сягаючи початкового значення. Можна припустити, що у зразку 2 із сформованими ЦЛ і домінуванням механізму (2) при фотозбудженні УЗО здебільшого призводить лише до теплового гасіння спектрів ФЛ (1 і 2 на рис. 1, б). При цьому присутня і деяка післядія (спектри 1 і 3, 4 на рис. 1, б), обумовлена впливом УЗО на ЦЛ, аналогічно дії УЗО на зразок 1. Свідченням цього є деякий довгохвильовий зсув спектрів 3, 4 відносно початкового (1), що відповідає зсуву спектрів 3, 4 відносно 1 на рис. 1, а.

Таким чином, ультразвукова обробка дозволяє впливати на спектральний склад фотолюмінесценції поруватого кремнію. Наведені дані підтверджують досить складний механізм виникнення фотолюмінесценції на межі "Si кристаліт-аморфна матриця". Можна припустити, що ультразвукова обробка здатна впливати на процеси переносу енергії в системі "Si наночастка- аморфна матриця-центр люмінесценції".

Література

1. Cullis A.G., Canham L.T. and Calcott P.D.J. The structural and luminescence properties of porous silicon// J. Appl. Phys. – 1997. – Vol 82, № 3. – p. 909-965.
2. Koropeccki R.R., Arce R.D., and Schmidt J.A. Photo-oxidation effects in porous silicon luminescence// Phys. Rev. B. – 2004. – Vol.69, № 20. – p. 205317_1-6.
3. Qin G.G., Li Y.J. Photoluminescence mechanism model for oxidized porous silicon and nanoscale-silicon-particle-embedded silicon oxide// Phys. Rev. B. – 2003. – Vol.68, № 8. – p. 085309_1-7.

Надійшла до редакції 18.04.2006

УДК 535.32/34

Поперенко Л.В., д-р фіз.-мат. наук,
проф.,
Григорук В.І., д-р фіз.-мат. наук,
проф.,
Носач Д.В., асп.

Особливості деформації шару оксиду хрому на поверхні нержавіючої сталі при мікроіндентуванні

Досліджено особливості деформації шаруватої системи „пасивуюча плівка нержавіючої сталі - плівка CrO_x “, отриманої при різних параметрах магнетронного напылення.

E-mail: plv@univ.kiev.ua, nosach_d@ukrpost.net

Завдяки своїм фізичним властивостям нержавіючі сталі мають широкий спектр застосувань, і зокрема в тих аспектах, де головну роль відіграє пасивуюча плівка на поверхні. Серед провідних напрямків застосування є медична фізика, де визначальним стає контакт цього матеріалу із біологічними об'єктами. Зазвичай, в нормальних умовах на поверхні нержавіючої сталі формується захисний шар, переважно із оксиду хрому CrO_x завтовшки 1.5-3 нм, що є причиною для її слабкої корозії в сухому чи водному навколишньому середовищі. Але, з часом, під впливом певних складових оточуючого середовища, корозійна стійкість поверхні нержавіючої сталі може погіршуватись.

Для підвищення корозійної стійкості та запобігання можливого руйнівного впливу оточуючого середовища зразки нержавіючої сталі ((SS) AISI 316) були покриті плівками CrO_x та Cr при різних параметрах осадження, які наведені в таблиці.

Таблиця

Технологічні параметри осадження плівок CrO_x та Cr на поверхню нержавіючої сталі

Зразок	Тип нанесеної плівки	Тиск в камері, Па	Тиск кисню, Па	Напруга магнетрона, В	Напруга на підкладці, В	Час процесу, хвилини
ss-0	-	-	-	-	-	-
ss-9	CrO_x	4×10^{-3}	4×10^{-1}	529	0	5
ss-11	CrO_x	4×10^{-3}	4×10^{-1}	498	400	5
ss-14	Cr	$3,2 \times 10^{-3}$	-	462	800	5

Poperenko L. V., prof.,
Grygoruk V. I., prof.,
Nosach D. V., Ph.D. student.

Special features of deformation of functional layers formed by the oxide of chromium on the surface of stainless steel at microindentation

The deformation of layer system "stainless steel - chromium oxide" was investigated with variation of different parameters of film magnetron deposition.

Після покриття відповідних зразків нержавіючої сталі хромом та оксидом хрому фізичні властивості приповерхневих шарів змінилися. Для оцінки мікротвердості поверхневих шарів отриманих зразків проведено їх аналіз за методом Віккерса, діючи на поверхню алмазною пірамідою з площею контакту $S=1,574 \text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 1.00 Г та площею контакту $S=15,101 \text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 5.00 Г.

Так, на рис.1. зі збільшенням (1200х), зображено поверхню зразка нержавіючої сталі, покритої плівкою CrO_x , з місцями дії алмазних наконечників різної площі поверхні контакту та при різному ступені навантаження (1- результат дії наконечника з площею контакту $S=1,574 \text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 1.00 Г, 2- результат дії наконечника з площею контакту $S=15,101 \text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 5.00 Г).

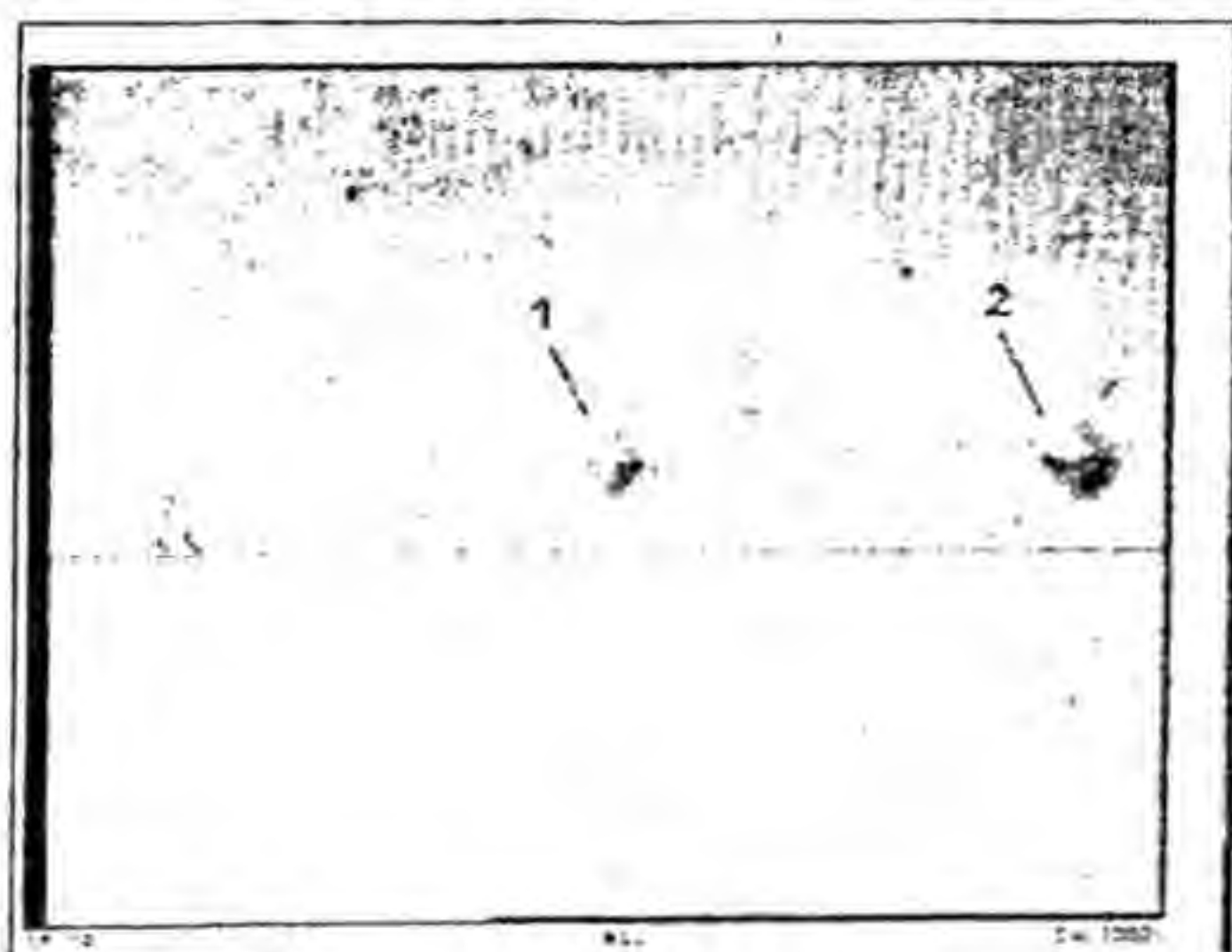


Рис. 1. Зображення поверхні зразка нержавіючої сталі покритої плівкою CrO_x , де 1- місце дії алмазного наконечника площею $S=1,574 \text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 1.00 Г, 2- місце дії алмазного наконечника площею $S=15,101 \text{ мкм}^2$ при

Результати оцінки мікротвердості поверхневих шарів отриманих зразків наведено на графіках залежності глибини проникнення алмазних наконечників при навантаженнях від 0 до 1.00 Г (рис.2), та навантаженні від 0 до 5.00 Г (рис.3).

З рис.2 видно, що при дії на поверхню нержавіючої сталі, покритих плівкою CrO_x чи Cr, алмазним наконечником площею $S=1,574 \text{ мкм}^2$ з навантаженнях від 0 до 1.00 Г, мікротвердість приповерхневого шару зразків (ss-9 (CrO_x), ss-11 (CrO_x), ss-14 (Cr)) по відношенню до відповідного шару чистої нержавіючої сталі (ss-0) підвищилась: для зразка ss-9 на $\approx 17\%$, для ss-11 на $\approx 13\%$, а для зразка ss-14 на $\approx 10\%$. Причому, більша мікротвердість поверхневого шару зразка ss-9 по відношенню до поверхонь інших зразків може бути обумовлена тим, що на відміну від зразків ss-11 та ss-14, в технології його виготовлення не було використане

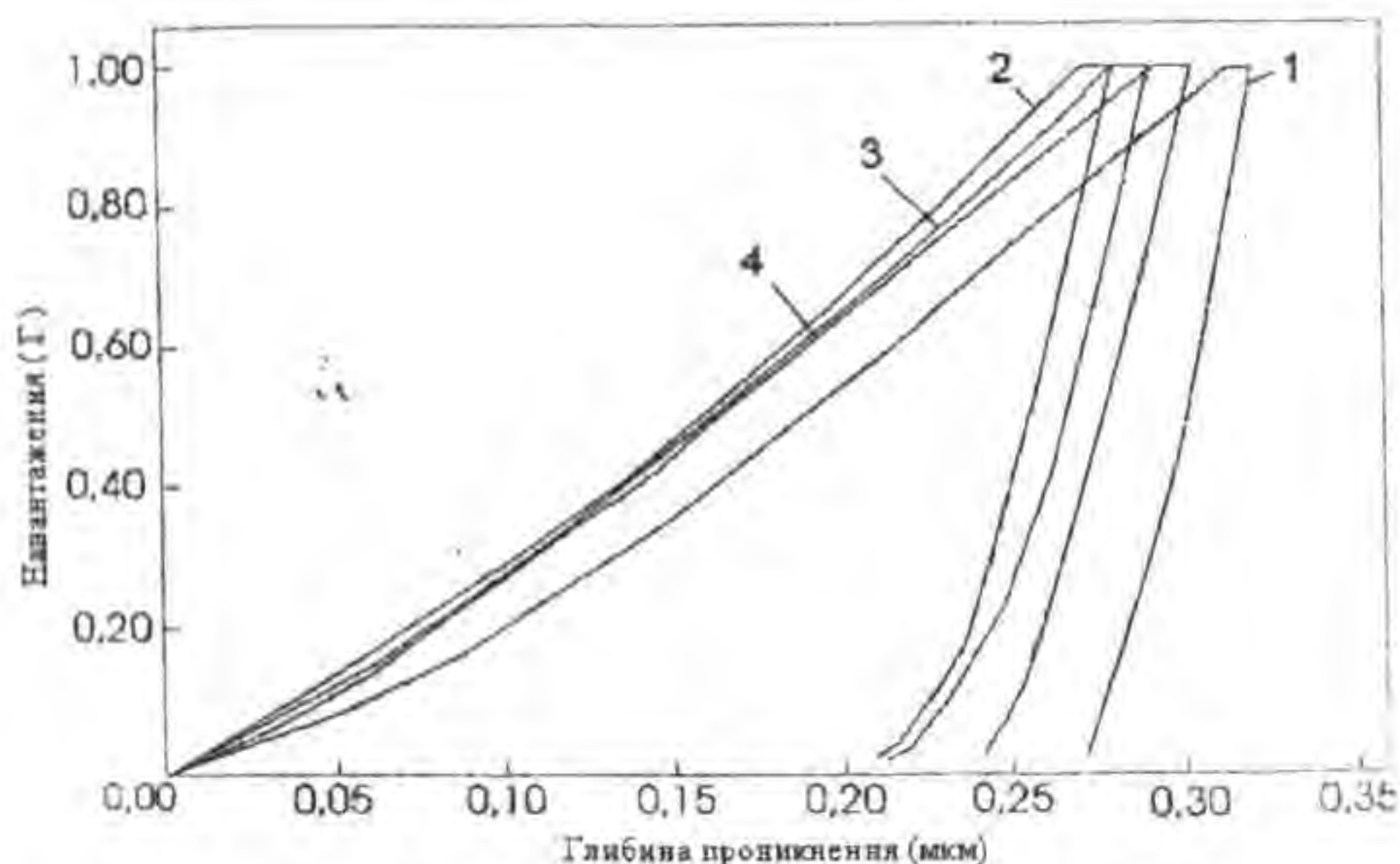


Рис.2. Залежність глибини проникнення алмазного наконечника площею $S=1,574\text{мм}^2$ при навантаженні від 0 до 1.00 Г для зразків ss-0 (крива 1), ss-9 (2), ss-11(3), ss-14(4).

прикладання напруги до підкладки під час розпилення Cr на поверхню нержавіючої сталі. В той же час, відсутність подачі кисню при розпиленні хрому в вакуумній камері на поверхню нержавіючої сталі вплинула на властивості зразка ss-14 таким чином, що його поверхневий шар має меншу мікротвердість, ніж поверхневий шар зразків ss-9 та ss-11, що були отримані з використанням подачі кисню у вакуумну камеру під час розпилення хрому на нержавіючу сталь.

Трохи інша картина спостерігається при дії на ті ж зразки нержавіючої сталі, покритої плівкою CrO_x чи Cr, алмазним наконечником площею $S=15,101\text{мм}^2$ при навантаженні від 0 до 5.00 Г (рис.3).

Мікротвердість приповерхневого шару зразків (ss-9 (CrO_x) та ss-14 (Cr)) по відношенню до відповідного шару чистої нержавіючої сталі (ss-0) зменшилась. Зміни, хоча і незначні ($\approx 4-5\%$), але помітні при максимальному навантаженні 5.00 Г. На відміну від попередніх результатів, поверхня зразка ss-11, напилення плівки якого відбувалось з прикладанням напруги до підкладки та з використанням подачі кисню у вакуумну камеру під час розпилення хрому на нержавіючу сталь (табл.), має кращу (на 4%) мікротвердість за поверхню чистої нержавіючої сталі.

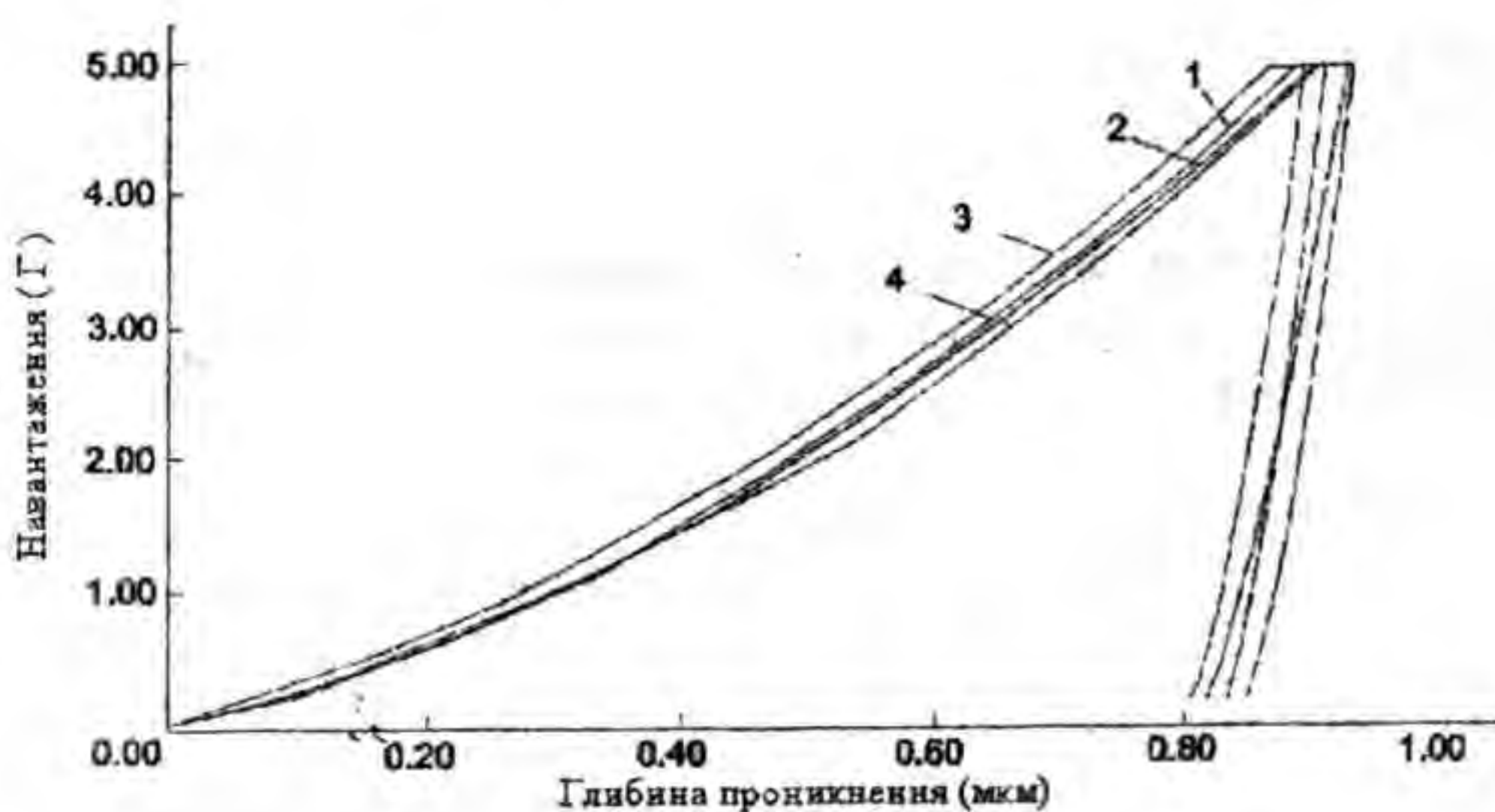


Рис.3. Залежність глибини проникнення алмазного наконечника площею $S=15,101\text{ мкм}^2$ при навантаженні від 0 до 5.00 Г для зразків ss-0 (крива 1), ss-9 (2), ss-11(3), ss-14(4).

Підсумовуючи, можна зробити висновок, що при незначних площах контакту порядку 1 мкм^2 та навантаженнях до 1.00 Г – кращу за чисту поверхню зразків нержавіючої сталі AISI 316 міцність мають всі отримані зразки нержавіючої сталі з напиленими на них плівками CrO_x чи Cr (ss-9, ss-11, ss-14). Але при збільшенні площі контакту до 10 мкм^2 та навантаженнях до 5.00 Г – кращу, ніж у чистої поверхні зразків нержавіючої сталі, мікротвердість має лише один зразок ss-11, у виготовленні якого використано подачу кисню в камеру та прикладання напруги до підкладки із нержавіючої сталі AISI 316. Це означає, що осадження на поверхні зразків нержавіючої сталі плівкових покриттів із оксиду хрому з метою створення стійких функціональних шарів є більш перспективним, ніж процес осадження плівок хімічно чистого хрому на поверхню нержавіючої сталі AISI 316.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Steinemann S.G/ *Tissue compatibility of metals from physico-chemical principles. Proc. of the Sump. on "Compatibility of biomedical implants"* / Ed. by Paul Kovacs and Naim S. Istephanous. The Electrochemical Society Inc. 1994p.
2. Poperenko L.V., Vinnichenko M.V., Maitz M.F. *Investigation of chromium oxide films grown on stainless steel surfaces by means of magnetron sputtering. Abs. of III Intern. Young Scientist Conf. "Problem of Optics and High Technology Material Science"* –K, 2002p.
3. Геллер Ю. А., Рахштадт А. Г. *Материаловедение*, 4 изд., М., 1975p.

УДК 532.536

Рудніков Є.Г., к. ф.-м. н.
Альошин О.Д., проф., д. ф.-м. н.

Розширене рівняння кривої співіснування рідин поблизу критичної точки

В роботі запропоноване розширене рівняння кривої співіснування рідини, основане на Ван-дер-Ваальсовій моделі газу флуктуацій. Параметри цього рівняння, які залежать від сил міжмолекулярної взаємодії, виражені через фактор стисливості речовини.

Ключові слова: крива співіснування, флуктуація, рівняння стану, фактор стисливості

E.G. Rudnikov, Ph.D.
O.D. Alekhin, Prof., Dr. Sc.

Extended equation of coexistence curve for liquid near the critical point

Extended equation of coexistence curve for liquid based on the Van der Waals model of fluctuation gas has been proposed. Parameters of the equation, which depend on molecular interchange forces, are expressed via compressibility factor of substance.

Key Words: coexistence curve, fluctuation, equation of state, compressibility factor

E-mail: alekhin@mail.univ.kiev.ua

Дослідження рівняння стану рідини поблизу критичної точки (КТ) продовжує залишатись однією з актуальних задач фізики конденсованого стану речовини. Нині існує ряд відомих і широко апробованих різноманітних методів, що дозволяють побудувати рівняння стану для опису фізичних властивостей речовини в широкому діапазоні термодинамічних параметрів, включаючи і близький окіл КТ. До них відносяться метод алгебри флуктуюючих величин та ренормалізаційної групи (РГ) [1,2], метод розширених розкладів [3,4].

Впродовж цих досліджень метою даної роботи є розробка розширеного рівняння кривої співіснування речовини поблизу КТ в рамках Ван-дер-Ваальсової моделі газу флуктуацій [5,6]. Виходячи з цієї моделі дане рівняння стану має вигляд

$$\Delta\rho=(\rho-\rho_k)/\rho_k=\pm B_0|t|^\beta\pm B_1|t|^{\beta+\Delta}+B_2|t|^{2\beta}+B_3|t|^{\beta+\nu} \quad (1)$$

Виходячи з [7], параметри цього рівняння B_n , залежать від сил взаємодії між кластерами флуктуацій, тобто від критичної температури речовини, що перевірено в [8].

Раніше в роботах [9-11] зв'язок асимптотичної амплітуди B_0 рівняння стану (1) із силами міжмолекулярної взаємодії був представлений залежністю цієї величини від фактора стисливості

$Z_k = P_k V_k / RT_k$. Тут P_k , V_k , T_k – критичні тиск, об'єм, температура. При цьому було показано, що величина B_0 суттєво залежить від вибору критичного показника β . Так в роботі [9] при використанні значення критичного показника $\beta = 0,5 > 1/3$ амплітуда B_0 представляється у вигляді

$$B_0(\beta=0,5) = 1 + 3,2213 \cdot (0,307 - Z_k)^{0,5} \quad (2)$$

В інших роботах при виборі значення $\beta < 1/3$ величина B_0 задовольняє рівнянню [10,11]

$$B_0(\beta=0,2491) = 1 + 1,7811 \cdot ((0,306 - Z_k)/0,306)^{0,2491} \quad (3)$$

Як бачимо, використання різних величин критичних показників (β) приводить до різного виду співвідношень $B_0(Z_k)$. Ці значення критичних показників β суттєво відрізняються від відомих теоретичних розрахунків цих величин: на основі 3-вимірної моделі Ізінга, ϵ -розкладів [12,13], методу введення в рівняння флуктуаційної теорії фазових переходів (ФТФП) малих параметрів [14]. За допомогою цього методу з похибкою не більше 1% було одержано значення критичного показника $\beta = 0,338$, яке узгоджується з теоретичними розрахунками [12,13], а також підтверджується більшістю експериментальних даних [7,8,12].

Використовуючи саме це значення показника β величина амплітуди $B_0(Z_k)$ (1) для ряду індивідуальних рідин можуть бути представлена у вигляді:

$$B_0(\beta=0,338) = 1 + 1,85 \cdot ((0,306 - Z_k)/0,306)^{0,338} \quad (4)$$

На рис. 1. показано графіки залежностей $B_0(Z_k)$ (4), а також залежності (2) і (3)

Впродовж цих розрахунків на доданок до залежності $B_0(Z)$, використовуючи величини критичних показників $\nu = 0,636$ і $\beta = 0,338$, які слідує з розрахунків [14], а також показника $\Delta = 1/2$ [15], були розроблені рівняння для визначення всіх інших параметрів $B_n(Z_k)$ рівняння стану (1) у вигляді

$$B_1 = 0,03 + 0,8 \cdot ((0,306 - Z_k)/0,306)^{\beta+\Delta} \quad (\beta+\Delta=0,838) \quad (5)$$

$$B_2 = 0,03 + 0,33 \cdot ((0,306 - Z_k)/0,306)^{2\beta} \quad (2\beta=0,674) \quad (6)$$

$$B_3 = 0,2 + 3,1 \cdot ((0,306 - Z_k)/0,306)^{\beta+\nu} \quad (\beta+\nu=0,974) \quad (7)$$

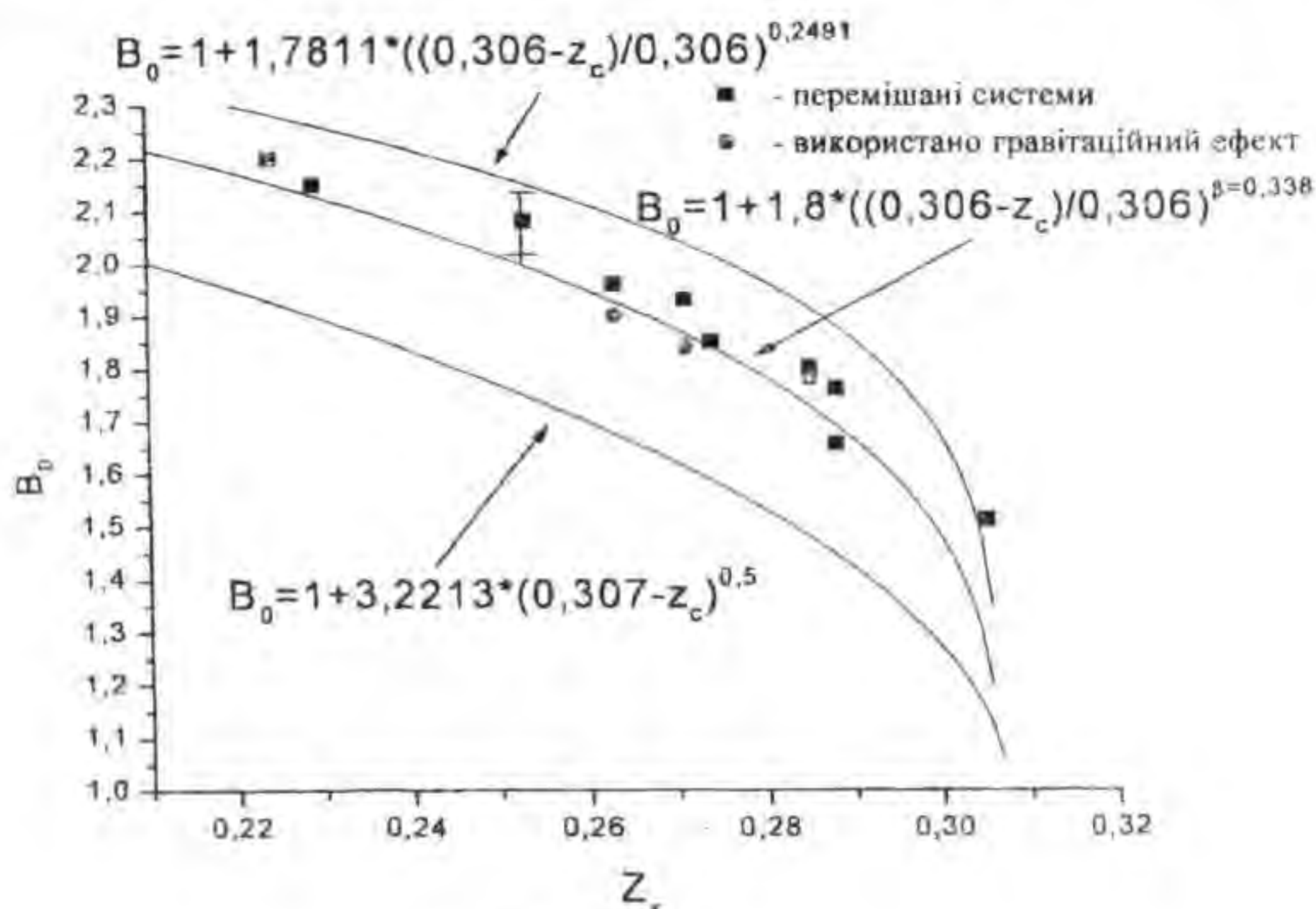


Рис. 1.

Аналіз експериментальних даних поблизу КТ, проведений в [16] показує, що розширене рівняння кривої співіснування (1) на основі Ван-дер-Ваальсової моделі газу флуктуацій [5,6], в якому коефіцієнти B_n мають вигляд (4)–(7), в межах похибок експерименту адекватно описує поведінку густини рідинних систем у флуктуаційній області в широкому інтервалі температур $t \leq 10^{-1}$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Cheng Hongyuan, M.A. Anisimov, J.V. Sengers / Fluid Phase Equilibria 1997. – 128, 67.
2. M.E. Fisher, Shun-Yang Zinn, P.J. Upton. Trigonometric models of scaling behavior near criticality. // Phys. Rev. B. 1999. – V. 59, N 22 – P. 14533–14545.
3. Cooper M.J. Extended formulation of thermodynamic scaling in critical region // J. Res. NBS. Phys. and Chem.. – 1970. – Vol. 75 A, N 2. – P. 103
4. Чалый А.В. Разложения по обратному радиусу корреляции // УФЖ – 1976. – Т. 21, № 3. – С. 474–476.
5. Алехин А.Д. Модель Ван-дер-Ваальса и масштабный закон вблизи критической точки // Известия вузов. Физика. – 1983. – Вып.3. – С. 103–105.

6. Алехин А.Д., Булавин Л.А. Модель Ван-дер-Ваальса и расширенное масштабное уравнение состояния вещества // УФЖ –1991. –Т. 36, № 3. – С. 383–387.
7. Альохін О.Д., Булавін Л.А., Рудніков Є.Г., Безручко І.В., Шиманська О.Т. Рівняння кривої співіснування фреону-113 поблизу критичної точки // УФЖ. 2003, Т. 48, № 9. С. 936-938
8. Алёхин А.Д., Булавин Л.А., Остапчук Ю.Л., Рудников Є.Г., Шиманская Е.Т. Расширенное уравнение кривой сосуществования в ван-дер-Ваальсовой модели газа флуктуаций. / Международная конференция "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах". Сборник трудов. Махачкала, 2004. – С. 231-234.
9. Анисимов М.А., Рабинович В.А., Сычев В.В. Термодинамика критического состояния индивидуальных веществ. – М.: Энергоиздат, 1990. – 190 с.
10. Олейникова А.В., Шиманська О.Т., Шиманський Ю.І. Амплітуди масштабного рівняння кривої співіснування та міжмолекулярна взаємодія в індивідуальних рідинах. // Вісник київського університету, сер. фіз.-мат. наук, 1996. № 2., розд. 3. Київ, 253-260.
11. Рабинович В.А., Шелудяк Ю.Е., Попов П.В. Термодинамические свойства чистых веществ в критической области // Обзоры по теплофизическим свойствам веществ. – 1987. - № 2. – (64). – С. 1-92.
12. Анисимов М.А. Критические явления в жидкостях и жидких кристаллах. – М.: Наука. –1987. – 271 с.
13. Стенли Г. Фазовые переходы и критические явления. Пер. с англ.–М.: Мир, 1973. – 419с.
14. Alekhin A.D. critical indices for system of different space dimensionality. // Journal of Molecular Liquids. 2003. 120, 43-45.
15. Wegner F.J. Corrections to scaling laws // Phys. Rev. B: Solid state – 1972. – Vol. 5, N 11. – С. 4529–4536.
16. Alekhin A.D., Bulavin L.A., Ostapchuk Yu.L., Rudnikov E.G., Shimanskaya E.T. Coexistence curve of liquid near the critical point on the basis of Van der Waals model of gas of fluctuation. / 3th International Conference "Physics of liquid matter: modern problems" Kyiv, Ukraine 2005. Abstracts. P. 82.

Надійшла до редколегії 19.10.2005

УДК 532.582.7; 544.023.523

Храпатий С.В., аспір.,
Ковальчук В.І., наук. співр.,
Клепко В.В., проф.

Дослідження кінетики седиментації флокульованих суспензій каолініту

Гравіметричним та кондуктометричним методами виконані дослідження кінетики седиментації водних суспензій олексіївського каолініту у діапазоні змін рН середовища від 4 до 10. Встановлено, що збільшення показника рН призводить до зменшення за лінійним законом середнього розміру флокул та ущільненню осаду. Для кожного значення рН (4, 6.25, 7.05, 9.05, 10) отримані характеристики полідисперсності: кількість фракцій, мінімальний, середній та максимальний радіуси флокул каолінової суспензії. В області проміжних значень рН (6.25, 7.05, 9.05) кінетика седиментації описується скейлінговими залежностями, де час кросоверу визначає перехід від гравітаційного до дифузійного механізму формування осаду.

Ключові слова: седиментація, кондуктометрія, каолінит, флокула, дисперсність, скейлінг.

S.V.Khrapaty, PhD student,
V.I.Kovalchuk, Sci. Res.,
V.V.Klepko, Prof.

Studies of sedimentation kinetics of flocculated kaolin suspensions

Using gravimetric and conductometric methods, the sedimentation kinetics in aqueous suspensions of Alekseev kaoline has been studied for pH value range from 4 to 10. It has found that pH increasing leads to decreasing of mean radii of flocks linearly. The polydisperse characteristics, such as a number of fractions, minimum, maximum and mean radii of flocks have been calculated for pH=4, 6.25, 7.05, 9.05, 10. We found that sedimentation kinetics for intermediate pH values (6.25, 7.05, 9.05) can be described by scaling equations that crossover time defines transition from gravitational mechanism of deposition to diffusion one.

Key words: sedimentation, conductometry, kaoline, flocculus, dispersity, scaling.

Седиментація широко використовуються у багатьох важливих індустріальних процесах, таких як виробництво тонких плівок, високоякісних колоїдних кристалів, а також для вилучення твердої фази із водних розчинів, очищення забрудненої води тощо ([1] і посилання там). Швидкість процесу седиментації залежить від розміру частинок, ступіні їх агрегації та інших факторів (температури, концентрації, рН середовища, наявності поверхнево-активних речовин та електролітів у розчині). До того ж, одночасно має місце утворення та розпад кластерів, формування осаду та реорганізація його структури.

Метою даної роботи є дослідження кінетики седиментації водних суспензій олексіївського каолініту при зміні рН середовища. Для

експерименту ми обрали саме цю гідрофільну речовину, оскільки, по-перше, вона утворює високодисперсні системи, які осаджуються. По-друге, олексієвський каолінит, як і глуховецький, має широке практичне застосування у целюлозно-паперовій, хімічній, парфюмерній та харчовій промисловості, але, на відміну від останнього, є мало дослідженим. Частинки каолініту мають гексагональну форму [2] (з відношенням поперечного розміру до товщини близько 10) та великий дипольний момент [3], що виникає через адсорбцію диполей рідкої фази (гідроксильної групи). Наявність у таких частинок постійного дипольного моменту є причиною агрегації: частинки об'єднуються, утворюючи складні пухкі структури (пластівці, або флокули). Основні фізико-хімічні властивості каолінових суспензій описані ще у ранніх роботах [4,5], зокрема, у [5] було доведено переважну роль флокул, як фундаментальних структурних одиниць у гравітаційному формуванні осадів каоліну.

У нашому експерименті вміст твердої фракції каолініту складав 1.6% мас., як буферний електроліт використовувався водний розчин NaCl з концентрацією $C_{NaCl} = 10^{-2}$ Моль/л, показник рН середовища приймав значення 4.0, 6.25, 7.05, 9.05 і 10.0 [6].

Седиментаційний аналіз суспензій полягав у наступному. Як відомо [3,7], найбільш повну інформацію про дисперсійні характеристики досліджуваної системи надає $F(r)$ - функція розподілу щільності імовірності за масою частинок радіусу r . Для знаходження $F(r)$ для кожного із зразків, перш за все вимірювалася швидкість накопичення маси осаду $Q(t)$ на чашці торзійних ваг; далі, з використанням методики [7], були побудовані інтегральна $\Phi(r)$ та шукана диференціальна $F(r)$ криві розподілу

$$\Phi(t) = Q(t) - t \frac{dQ}{dt}, \quad F(r) = -\frac{d\Phi(r)}{dr}, \quad t = \frac{9\eta H}{2(\rho - \rho_0)gr^2},$$

де η - в'язкість розчину, H - відстань, яку проходить частинка за час t , $\rho(\rho_0)$ - щільність середовища (частинки), g - прискорення сили тяжіння.

Щоб додатково дослідити процес реструктуризації осадів, ми застосували кондуктометричний метод [8], причому один з електродів знаходився на дні сосуду (під шаром осаду, що утворюється). Виміри опору розчинів виконувались по звичайній схемі [9] з використанням мостика Уїтсона.

На рис.1 показані результати вимірювань $Q(t) = m(t)/m_0$, де m_0 - загальна маса твердої фази у розчині, і відношення $\varepsilon(t) = (\sigma_{max} - \sigma)/(\sigma_{max} - \sigma_{min})$, де σ_{max} та σ_{min} - максимальне і мінімальне значення провідності $\sigma = \sigma(t)$. На рис.2 представлені диференціальні

функції розподілу $F(r)$, для наочності нормовані на висоту кривої при $pH=4.0$. Номери кривих відповідають значенням pH : 1- $pH=4.0$, 2-6.25, 3-7.05, 4-9.05, 5-10.0. У середині рисунка наведена залежність середнього (найімовірнішого) радіусу частинок від показника pH .

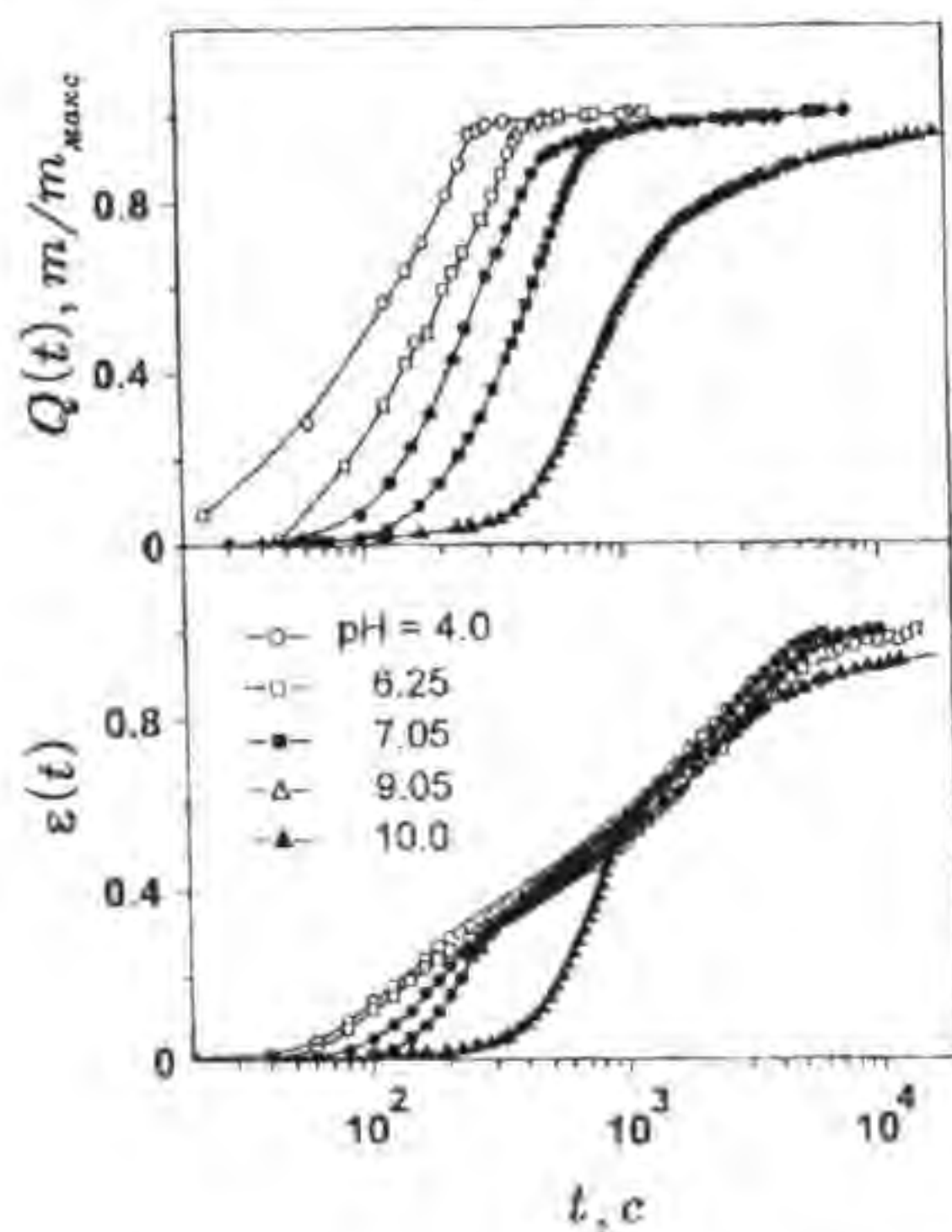


Рис. 1 Криві седиментації $Q(t)$ та кондуктометричні залежності $\varepsilon(t)$

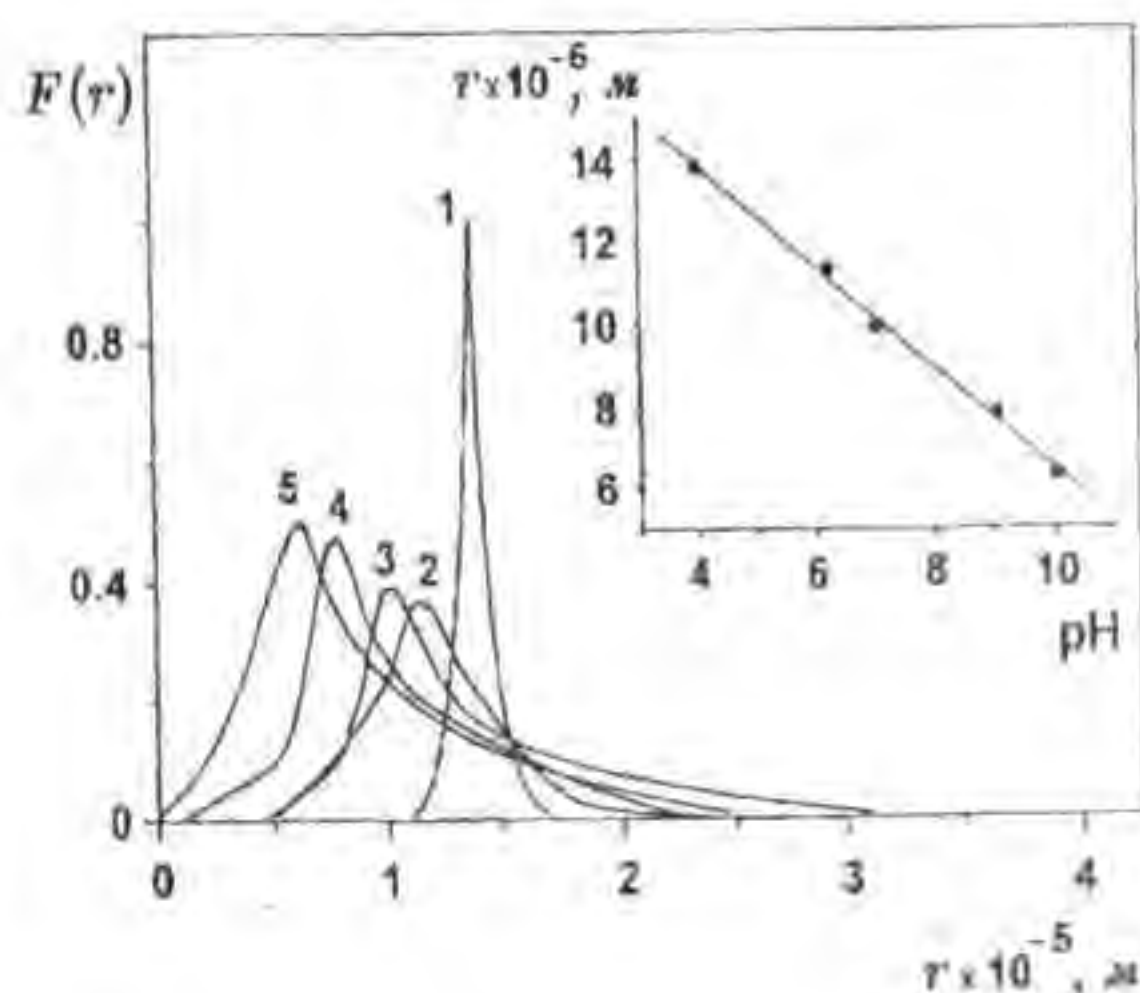


Рис. 2 Диференціальні криві розподілу за радіусами $F(r)$

З аналізу поведінки залежностей $Q(t)$ і $F(r)$ випливає, що із зростанням pH середовища час седиментації збільшується, а ефективний середній розмір флокул - зменшується. На збільшення дисперсності із зростанням pH вказує також і хід залежностей $\varepsilon(t)$: у нижній частині кривих спостерігається характерний вигин вправо. Якщо порівняти сімейство кривих $\varepsilon(t)$ із відповідними залежностями $Q(t)$, то можна прийти до висновку, що згаданий вигин відповідає початковому формуванню структури осаду, яка тим щільніше, чим більше pH . З іншого боку, осади флокульованих суспензій тим пухкіше, чим вище ступінь агрегації частинок, тому ущільнення осаду у даному випадку можна пояснити зменшенням ефективного середнього радіусу флокул. Лінійні ділянки кривих $\varepsilon(t)$ відповідають подальшому ущільненню осадів під дією гравітації (руйнування осаджених флокул). До речі, крива $\varepsilon(t)$, яка виміряна у системі з показником $pH=10$, майже повторює хід відповідної

залежності $Q(t)$, тобто осад у цій високодисперсній системі є найщільнішим, його структура формується одразу, без подальшої перебудови. Підсумовуючи вищесказане, ми приходимо до висновку, що збільшення рН середовища руйнує флокули, причому їх середній радіус $\bar{r}$ лінійно зменшується із зростанням рН (див. рис.2).

В табл.1 наведені дисперсні характеристики досліджених каолінових суспензій: максимальний час седиментації $t_{\text{макс}}$, кількість фракцій $n_{\text{ф}}$, мінімальний $r_{\text{мін}}$, середній $\bar{r}$ і максимальний $r_{\text{макс}}$ радіуси флокул.

Таблиця 1

Характеристики полідисперсності водних суспензій олексіївського каолініту

N	pH	$t_{\text{макс}}, \text{с}$	$n_{\text{ф}}$	$r_{\text{мін}}, \text{МКМ}$	$\bar{r}, \text{МКМ}$	$r_{\text{макс}}, \text{МКМ}$
1	4.00	508	5	11.0	13.8	16.9
2	6.25	1238	6	5.0	11.3	24.0
3	7.05	7761	7	4.8	9.9	31.0
4	9.05	13748	6	1.1	7.8	22.1
5	10.0	94350	8	0.2	6.3	25.0

Одержані експериментальні дані $Q(t)$, $\varepsilon(t)$ були проаналізовані також у рамках скейлінгового підходу [10]. Ми виходили з того, що в умовах нерівноважного росту осадів мають місце два конкуруючих механізми [11-13]: гравітаційний, який обумовлює седиментацію та намагається зруйнувати (ущільнити) структуру осаду, та дифузійно-обмежений, що веде до фрактальної агрегації осаджених частинок. Результати аналізу дозволяють стверджувати, що для проміжних значень рН (6.25, 7.05, 9.05) спостерігається універсальність кінетики седиментації: $Q \sim (t/t_c)^{k_1^{(Q)}}$ та $\varepsilon \sim (t/t_c)^{k_2^{(\varepsilon)}}$ із скейлінговими показниками $k_1^{(Q)} = 2.61$, $k_1^{(\varepsilon)} = 3.45$ для $t/t_c \leq 1$ та $k_2^{(Q)} = 0.01$, $k_2^{(\varepsilon)} = 0.38$ для $t/t_c \geq 1$. Дана універсальність зберігається також і в області кроссоверу t_c , який характеризує перерозподіл між гравітаційним (1) та дифузійним (2) внесками у процес формування осаду.

Таким чином, в результаті аналізу проведених експериментів обчислені характеристики полідисперсності каолінових суспензій та встановлено, що

1. Із збільшенням рН середовища зменшується середній ефективний радіус флокул (має місце лінійна залежність), а кількість фракцій, час седиментації та щільність осаду зростає. Зменшення показника рН призводить до агрегації частинок (флокуляції), прискоренню седиментації та зменшенню щільності осаду.

2. Для проміжних значень рН (6.25, 7.05, 9.05) кінетика седиментації описується скейлінговими залежностями $Q \sim (t/t_c)^{k^{(Q)}}$ та $\varepsilon \sim (t/t_c)^{k^{(\varepsilon)}}$, де час кросоверу t_c визначає перехід від гравітаційного до дифузійного механізму формування осадів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Russel W.B., Saville D.A., Schowalter W.R. Colloidal Dispersions. – Cambridge: Cambridge University Press, 1989. – 517 p.
2. Macha S., Baker S., Fitch A. Clays and Electrochemistry. An Introduction: Electrochemical Properties of Clays. – A.Fitch ed., The Clay Minerals Society, Aurora Co., 2002. – 62 p.
3. Фролов Ю.Г. Курс коллоидной химии: Поверхностные явления и дисперсные системы. – Л.: Химия, 1984. – 368 с.
4. Michaels A.S., Bolger J.C. Settling rates and sediment volumes of flocculated kaolin suspensions // Ind. Eng. Chem. Fundamentals. – 1962. – Vol.1, No.1. – P.24 – 33.
5. Michaels A.S., Bolger J.C., The plastic flow behavior of flocculated kaolin suspensions // Ibid. – 1962. – Vol.1, No.3. – P.153 – 162.
6. Bulavin L.A., Khrapaty S.V., Boiko Y.P., Lebovka N.I. Gravimetric and electric conductivity studies of flocculated kaolin suspensions // Abstr. 2th Intern. Conf. Physics Of Liquid Matter: Modern Problems, 2003. – P.97.
7. Панич Р.М., Воюцкий С.С., Иванова Н.Н. и др. Практикум по коллоидной химии и электронной микроскопии. – М.: Химия, 1974. – 224 с.
8. Рабинович Ф.М. Кондуктометрический метод дисперсного анализа. – Л.: Химия, 1970. – 176 с.
9. Starchenko V.Yu., Bulavin L.A., Boiko Yu.P. et al. Conductometric and gravimetric studies of the kinetics of graphite sedimentation in aqueous dispersions // Coll. Journ. – 2005. – Vol.67, No.6. – P.755-759.
10. Федер Е. Фракталы: Пер. с англ. – М.: Мир, 1991. – 254 с.
11. Talbot J., Tarjus G., Van Tassel P.R., Viot P. From car parking to protein adsorption: an overview of sequential adsorption processes // Journ. Phys. A. – 1999. – Vol.32, P.2997-3048.
12. Gonzalez A.E. Colloidal aggregation in the presence of a gravitational field // Condens. Matter. – 2002. – Vol.14, P.2335-2345.
13. Odriozola G., Leone R., Schmitt A. et al. Coupled aggregation and sedimentation processes: The sticking probability effect // Phys. Rev. E. – 2003. – Vol.67, P.031401-031405.

Надійшла до редколегії 27.04 2006 р.

УДК 535.34

І.А. Шайкевич, проф.
Л.Ю. Мельниченко, ст.н.с.
Б.Б.Титарчук, аспір.

Вплив шорсткості поверхні на вимірювані оптичні сталі алюмінію

Методом Бітті, удосконаленим для вимірювання оптичних сталей шорстких поверхонь, одержані спектральні залежності оптичної провідності σ ряду алюмінієвих дзеркал з різною шорсткістю поверхні. Середньоарифметичне відхилення профілю поверхні R_a вимірювалось на профілометрі ДЕКТАК-3030. Одержані результати були інтерпретовані на основі електронної теорії шорстких поверхонь. При цьому виявлені два механізми впливу R_a на оптичну провідність, один з яких приводить до зменшення σ з ростом R_a , а другий до зростання σ із зростанням R_a .

Ключові слова: шорсткість поверхні, оптична провідність, еліпсометричні параметри.

E-mail: shaykevi@univ.kiev.ua

Вступ

Алюмінієві дзеркала мають широке застосування в різних оптичних і опто-електронних приладах. Але їх оптичні властивості, зокрема коефіцієнт відбивання, еліпсометричні параметри відбитого світла залежать від стану поверхні дзеркал, тобто від шорсткості поверхні і перехідного шару окису і адсорбованих речовин. Вплив цих факторів вивчався в різних роботах. Але якщо вплив шару окису і адсорбованих речовин вивчався детально в багатьох роботах, як це відзначається в [1], то експериментальному вивченню впливу шорсткості поверхні на оптичні властивості присвячено порівняно не багато робіт. Справа в тому, що шорсткість впливає на еліпсометричні параметри відбитого світла, а значить і на обчислені оптичні сталі: показник заломлення n , показник поглинання k і оптичну провідність σ . Особливо цікаво визначити вплив

I.A. Shaykevich, prof.
L.Yu. Melnichenko, senior research.
B.B.Tytarchuk, post grad.stud.

Influence of surface roughness on the measured optical constants of aluminium

Spectral dependencies of optical conductivity σ of aluminium mirrors with different surface roughness were obtained with modified for measuring of optical constants of rough surface Beatty method. Average arithmetic deviation of surface profile R_a was measured with profilometer DEKTAK-3030. The obtained results were interpreted with electron theory of rough surfaces. Two mechanisms of influence of R_a on optical conductivity were discovered. The first mechanism yield to decreasing of σ with R_a increasing. The second mechanism yield to increasing of σ with increasing of R_a .

Key Words: surface roughness, optical conductivity, ellipsometric parameters.

шорсткості на спектральні залежності оптичних сталих, бо саме завдяки ним можна вивчати фізичні процеси в металах і сплавах. Але в більшості експериментальних робіт вивчався вплив шорсткості на оптичні властивості лише для однієї довжини хвилі. Так в роботах [2,3], вивчався вплив шорсткості на еліпсометричні параметри мідних дзеркал для однієї довжини хвилі. В роботі [4] для трьох довжин хвиль, що теж не можна вважати спектральною залежністю. В роботі [5] були проведені дослідження спектральних залежностей оптичних сталих алюмінієвих дзеркал алмазного мікроточіння, але закономірності поведінки оптичних сталих від шорсткості поверхні виявлені не були. Лише в роботі [6] були досліджені спектральні залежності оптичної провідності σ в ультрафіолетовій, видимій та ближній інфрачервоній ділянках спектру при різних відомих шорсткостях поверхні для алюмінієвих дзеркал. В цій роботі ми продовжили дослідження спектральних залежностей оптичних сталих алюмінієвих дзеркал з різною шорсткістю поверхні (з різним середньоарифметичним відхиленням профілю поверхні від ідеальної площини R_a).

Методика експерименту

В роботі [7] була розроблена нова методика вимірювання еліпсометричних параметрів, заснована на відомому методі Бітті [1]. Методика ґрунтується на тому факті, що кожна з компонент падаючого світла на шорстку поверхню (маються на увазі p - та s -компоненти) відбивається від шорсткої поверхні не лінійно-поляризованою (з поляризацією в тому ж напрямі), а частково поляризованою, тобто викликає і взаємно-перпендикулярно поляризовану компоненту, яка є некогерентною компонентою. Її треба відняти від загальної інтенсивності і одержати когерентну компоненту і для p -, і для s -напрямків. Слід відзначити, що методика справедлива для порівняно невеликих відхилень профілю поверхні від ідеальної площини. Для значних шорсткостей, коли деполаризація світла велика, методика буде давати значну похибку. Аналогічно визначається і когерентна компонента при орієнтації аналізатора під кутом 45° для p - та s -компонент. Потім по одержаним значенням когерентних компонент по формулам Бітті [1] визначають зсув фаз між p - та s -компонентами Δ , азимут відновленої лінійної поляризації Ψ і обчислюють оптичні сталі зразка n , k , а також оптичну провідність σ .

Експериментальні результати, та їх обговорення

Нами були досліджені чотири дзеркальні зразки алюмінію, а саме три масивних полірованих дзеркала і алюмінієва фольга, наклеєна на гетинаксову основу. Профіль поверхні всіх зразків записувався на профілометрі ДЕКТАК-3030 контактного типу. По одержаним

профілограмам обчислювалось середньоарифметичне відхилення профілю поверхні від ідеальної площини R_a . Були одержані наступні результати. Для зразка 1- $R_a=140\text{\AA}$; для зразка 2- $R_a=200\text{\AA}$; для зразка 3- $R_a=300\text{\AA}$; для фольги, яку ми пронумерували як зразок 4, $R_a=400\text{\AA}$. На рис.1 наведені залежності оптичної провідності σ від довжини світлової хвилі λ для всіх

зразків. Номери зразків і номери кривих на рис.1 співпадають. Як впливає з рис.1, розходження між кривими найбільше в інфрачервоній ділянці спектру, особливо для максимуму оптичної провідності при $\lambda \approx 800\text{ нм}$, пов'язаного з поглинанням, викликаним міжзонними переходами в К- та W-точках зони Бріллюена.

Із зменшенням довжини хвилі це розходження зменшується і мінімальне в ультрафіолетовій ділянці спектру.

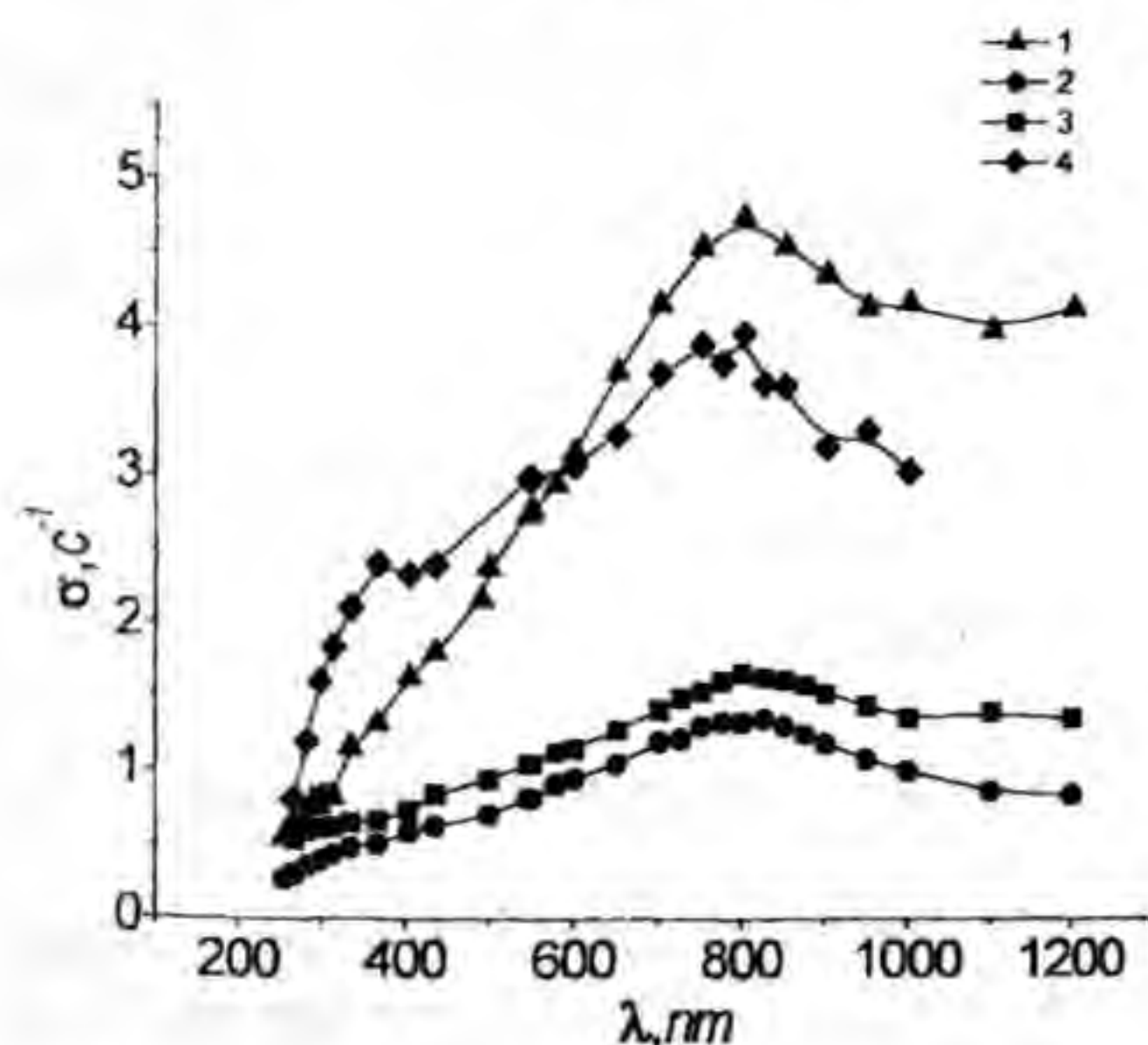


Рис.1.

Останнє можна пояснити тим, що коли довжина світлової хвилі λ значно більша відхилень профілю поверхні від ідеальної площини, розсіяння світла на шорсткостях відчувається менше, ніж коли довжина хвилі наближається по величині до розмірів окремих горбів і западин на поверхні.

Більш цікавим є факт взаємного розміщення кривих 1-4 на рис.1 по абсолютній величині σ . Найвищою є крива 1 з найменшим значенням R_a , але наступна крива з меншим R_a є найнижчою, і далі із збільшенням R_a відбувається зміщення кривих по висоті в бік більших σ . Таку цікаву залежність можна пояснити наступним чином. Відомо [1], що максимально великий коефіцієнт відбивання R , мінімальна поглинальна здатність A , і максимальний показник k , а значить і максимальна оптична провідність спостерігаються для ідеально гладкої поверхні металу. При нормальному падінні світла:

$$A=1-R \quad (1)$$

$$R=\frac{(n-1)^2+k^2}{(n+1)^2+k^2} \quad (2)$$

$$\sigma = nk\nu \quad (3)$$

де ν - частота світла.

Згідно [1] поглинальна здатність A металу, викликана вільними електронами, складається з об'ємної частини A_{ob} і A_{nos}

$$A = A_{ob} + A_{nos} \quad (4)$$

де

$$A_{ob} = \frac{2\nu}{\omega_p}; \quad A_{nos} = \frac{3V_F \bar{P}}{4c} \quad (5)$$

ν - повна частота співударів електронів,

ω_p - плазмова частота,

V_F - швидкість електронів на поверхні Фермі,

c - швидкість світла,

$\bar{P}$ - коефіцієнт дифузного розсіювання електронів на поверхні зразка.

Згідно формул (4)-(5) впливає наступне. Для ідеально гладкої поверхні металу $\bar{P}=0$ і залишається тільки A_{ob} . Таким чином має місце те, що відзначалося вище, а саме для ідеально гладкої поверхні A - мінімальне, R - максимальне і максимальна оптична провідність σ . Із збільшенням шорсткості поверхні $\bar{P}$ зростає і відповідно збільшується A і зменшується σ . Але тут вступає в дію ще один механізм поглинання на шорсткій поверхні. Шорстку поверхню можна розглядати у вигляді гетерогенного тонкого шару, який складається з гранул металу (горби і западини на поверхні зразка) та діелектричних проміжків між ними (повітря і частково поверхневий окис). Згідно [8] комплексна поляризованість i -ої частинки $\tilde{\alpha}_i$, яка має еліпсоїдальну форму, описується формулою:

$$\tilde{\alpha}_i = \frac{3}{4\pi \epsilon_m + f_i(\tilde{\epsilon} - \epsilon_m)} \quad (6)$$

де 3 - об'єм частинки,

ϵ_m - діелектрична стала середовища, в якому знаходиться частинка,

$\tilde{\epsilon}$ - комплексна діелектрична стала матеріалу частинки,

f_i - фактор форми.

Показник поглинання i -ої частинки k_i , помножений на її показник заломлення буде дорівнювати $\frac{1}{2}$ уявної частини $\tilde{\alpha}_i$,

$$n_i k_i = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \tilde{\alpha}_i = \frac{1}{2} \frac{9}{4\pi} \operatorname{Im} \left[\frac{\tilde{\epsilon} - \epsilon_m}{\epsilon_m + f_i (\tilde{\epsilon} - \epsilon_m)} \right] \quad (7)$$

Таким чином із збільшенням об'єму частинки, тобто із збільшенням розміру окремих шорсткостей, зростає показник поглинання частинки, помножений на показник заломлення $n_i k_i$, а значить і оптична провідність σ_i , яка визначається як :

$$\sigma_i = n_i k_i v \quad (8)$$

Коефіцієнт поляризації одиниці об'єму буде:

$$\tilde{\alpha} = N \tilde{\alpha}_i \quad (9)$$

де N - концентрація частинок.

Таким чином оптична провідність шорсткої поверхні металу визначається як:

$$\sigma = nk v = \frac{1}{2} (\operatorname{Im} \tilde{\alpha}) \cdot V = \frac{1}{2} (\operatorname{Im} N \tilde{\alpha}_i) \quad (10)$$

Отже розглянутий нами другий механізм приводить до збільшення оптичної провідності зразка при збільшенні шорсткості, тобто R_s .

Треба відзначити, що перший механізм (формули (4)-(5)) і щойно розглянутий другий механізм діють в протилежних напрямках і в залежності від того, який з них переважає, спостерігається чи збільшення, чи зменшення оптичної провідності σ . Саме це ми й спостерігаємо в розміщенні кривих на рис.1. Одержані результати показують, що максимальна провідність повинна бути для ідеально гладкої поверхні і при невеликих шорсткостях переважає перший механізм (крива 1). Із збільшенням шорсткості починає переважати другий механізм (криві 2,3,4). І, нарешті, при дуже великих шорсткостях, коли спостерігається практично дифузне розвіювання світла (таких шорсткостей ми не досліджували), повинен значно зменшуватись коефіцієнт дзеркального відбивання R_s і значно збільшуватись поглинальна здатність A , а значить і знову зменшуватись оптична провідність σ . Слід відзначити, що максимум квантового поглинання при $\lambda \approx 800$ нм при великих шорсткостях розмивається, що впливає з рис.1. Оскільки екстраполювати перехідний шар окису і адсорбованих речовин плоскопаралельним шаром при великих шорсткостях не можна, ми зробили обчислення шару окису і адсорбованих речовин тільки для зразка 1, для якого має місце мінімальне R_s . Розрахунки проводились по формулам Ейрі [9]. При цьому одержані такі результати. Показник заломлення шару окису та адсорбованих речовин дорівнював 1,6, а його товщина була 90Å

Висновки. Одержані експериментальні результати свідчать про те, що існує два механізми впливу шорсткості поверхні на оптичну провідність. Ці механізми мають протилежну дію, і в залежності від величини середньоарифметичного відхилення профілю поверхні R_a переважає той, чи інший механізм. При малих шорсткостях превалює механізм, який приводить до зменшення оптичної провідності при збільшенні R_a . При подальшому збільшенні шорсткості, тобто R_a , превалює механізм збільшення оптичної провідності. Нарешті, при значному збільшенні шорсткості поверхні знову повинно відбуватися зменшення оптичної провідності.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Носков М.М. Оптические и магнитооптические свойства металлов. Свердловск, ИИЦ АН СССР.- 1983.-219 с.
2. Ржанов А.В., Свиташева С.Н., Свиташев К.К., Соколов В.К., Ашкерев Ю.В., Осадчев Л.А., Цеснек Л.А. Эллипсометрический метод определения качества обработки поверхности//ДАН СССР.- 1982.-Т.267, №2.-С.373-377.
- 3.Петровский Г.Т., Пшеницын В.И., Антонов В.А., Васильева Л.К., Велицкая Е.Л., Яковкин С.В. Эллипсометрические измерения параметров шероховатости металлических зеркал//ДАН СССР. 1986.-Т.290,- №2.- С.317-321.
4. Чистый Л.И., Горохова Л.Н. Оптические свойства полированной медной поверхности//Поверхность. Физика, химия, механика.-1986.- №1.-С.100-107.
- 5.Одарич В.А., Панасюк В.Й., Стащук В.С. Спектри оптичних сталей алюмінієвих дзеркал алмазного мікроточіння// УФЖ.-1993.-Т.38,-№2.- С.208-211.
6. Міняйло Я.М., Розуван К.П., Шайкевич І.А. Вплив мікрорельєфу поверхні на оптичні властивості мідних та алюмінієвих дзеркал//Вісник Київського ун-ту. Сер.фіз.-мат. науки.-1998.-№2.-С.434-438.
- 7.Мельниченко Л.Ю., Пророк В.В., Титарчук Б.Б., Шайкевич І.А., Шарапа А.І. Оптичні властивості шорсткої поверхні анодованого алюмінію //Вісник Київського ун-ту. Сер. фіз.-мат. науки.-2002.-№3.-С.417-422.
8. Петров Ю.И. Физика малых частиц. М., Наука.-1982.-356 с.
9. Борн М., Вольф Э. Основы оптики.-1973.- 719 с.

Надійшла до редколегії 14.02.06 р.

Наукова бібліотека
ім. М. Максимовича
КНУ
ім. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА



12906JB

45 - чит. зал періодики та дисерт. Ц. 10.00

Отпечатано в типографії ЧП Гой О.В.
01042, г. Київ ул. П.Лумумбы, 4/6 корпус А

