

ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета

СЕРИЯ 1

Физика
Математика
Механика

2'94



СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

Комаров Л. И., Солодухин А. М., Цветков И. В. Полуфеноменологическая оценка поляризуемостей многоэлектронных атомов	3
Барковский Л. М., Жилко В. В., Лавриненко А. В. Расчет электрооптических призмённых модуляторов света для линейных и кольцевых резонаторов	8
Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф., Константинов Я. А. Исследование распространения рентгеновских лучей в планарных волноводах	13
Гулис И. М., Марковский О. Л., Цвирко В. А. Флуоресценция антрацена в матрицах Шпольского при селективном возбуждении	18
Клищенко А. П., Козлов И. Н., Слободянюк А. И. Статистический анализ работы двухканального поляриметра	21
Зажогин А. П., Серафимович А. И., Зажогин А. А. Донорная способность нейтральных лигандов и ее влияние на структурные и спектральные параметры уранилнитратов	24
Соколовский Т. Д., Шашков С. Н. Полная энергия и динамика решетки моносulfида кальция	27
Вилещиц Б. Б., Галич Н. Е., Умрейко Д. С. Аналогия между расходимостью светового пучка в турбулентной среде и самодефокусировкой в спутном потоке газа	30
Ревинский А. Ф. Расчет фононного спектра и теплоемкости кремния из первых принципов	33

МАТЕМАТИКА, МЕХАНИКА

Горбузов В. Н., Гнездовский Ю. Ю. О полиномиальных решениях систем алгебраических дифференциальных уравнений	37
Артемяева С. М., Кожеро М. В. Многомерные линейные дифференциальные уравнения с функционально-коммутативным оператором	40
Шилин А. П. К решению в замкнутой форме дискретных уравнений типа свертки с почти стабилизирующимися множителями	44
Бобков В. В., Бобкова Н. А. Об одном классе методов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений	47
Чинь Зань Данг (Вьетнам). О частной изохронности высших порядков дифференциальных систем Коши—Римана	50
Мельников О. И., Корнелюк Г. А., Климова Л. А. Реализация гиперграфов графами, гомеоморфными звезде	53
Синькевич Д. В., Труш Н. Н. Вычисление моментов высших порядков агрегированных частот состояний однородной марковской цепи для полиномиальной схемы	55
Гао Сюэдун (КНР). Решение двух кусочно-линейных задач оптимального управления	61
Габасов Р., Кириллова Ф. М. Оптимальная обратная связь по выходу	64
Покатаев А. В., Челисова Т. В. Алгоритм решения задачи геометрического программирования с простыми ограничениями на переменные	68

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Ермаков В. В., Сташкевич И. В. Первичный астигматизм оптических систем, содержащих анизотропные материалы	74
---	----

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

Дмитрий Степанович Умрейко	76
Николай Антонович Лукашевич	77

ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Издается с января 1969 года
один раз в четыре месяца

СЕРИЯ 1

**Физика
Математика
Механика**

2 '94

МАЙ



МИНСК
„УНІВЕРСІТЭЦКАЕ”

Главный редактор В. Г. РУДЬ
Ответственный секретарь П. Н. БАРАНОВСКИЙ

Редакционная коллегия серии:

А. И. КОМЯК (*ответственный редактор*),
Л. М. БАРКОВСКИЙ (*зам. ответственного редактора*),
В. Г. БАРЫШЕВСКИЙ, **А. М. БЕЛЬСКИЙ** (*ответственный секретарь*),
В. В. БОБКОВ (*зам. ответственного редактора*),
Е. С. ВОРОПАЙ, **Р. Ф. ГАБАСОВ**, **В. А. ГАЙСЕНКО**,
В. В. ГРУЗИНСКИЙ, **Э. И. ЗВЕРОВИЧ**, **Л. Н. КИВАЧ**,
Н. И. КОЗЛОВСКИЙ, **В. И. КОРЗЮК**, **П. Д. КУХАРЧИК**,
Н. А. ЛЕПЕШИНСКИЙ, **Г. А. МЕДВЕДЕВ**, **В. И. МИРОНЕНКО**,
С. Г. МУЛЯРЧИК, **В. Ф. СТЕЛЬМАХ**,
А. Ф. ЧЕРНЯВСКИЙ, **Н. И. ЮРЧУК**

ВЕСТНИК БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

Серия 1: Физ. Мат. Мех. 1994. № 2

Редактор *И. А. Лешкевич*
Младший редактор *Г. М. Добыш*
Художественный редактор *В. А. Ермоленко*
Технический редактор и корректор *Г. И. Хмарун*

Набор и верстка журнала выполнены на издательско-редакционной системе
«Союз»

Сдано в набор 08.04.94. Подписано в печать 18.05.94. Формат 70×108 1/16.
Бумага офс. Печать офсетная. Усл. печ. л. 7,0. Усл. кр.-отт. 7,52. Уч.-изд. л. 6,98.
Тираж 1505 экз. Заказ 341. Цена 400 р.

Издательство «Універсітэцкае». 220048, Минск, проспект Машерова, 11. Адрес
редакции: 220080, Университетский городок, тел. 20-65-42.

Типография издательства «Белорусский Дом печати».
220013, Минск, пр. Ф. Скорины, 79.



УДК 530.145

Л. И. КОМАРОВ, А. М. СОЛОДУХИН, И. В. ЦВЕТКОВ

ПОЛУФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

The model of independent particles for the polarizability of the many-electron atom calculation is presented. This model allows to take into account semiphenomenologically the regrouping between electron states in an atom. The general formulae to static and dynamic polarizability are derived.

В настоящее время теоретическая оценка физических характеристик тяжелых атомов возможна только с использованием моделей независимых частиц. Однако наиболее последовательная из таких моделей — приближение Хартри—Фока — неудобна из-за необходимости выполнения большого количества трудоемких вычислений и, что более существенно, не позволяет достаточно простым образом принимать во внимание эмпирические данные, содержащие информацию о влиянии неучитываемых в этой модели корреляционных эффектов. Исследования [1, 2, 3] обращают внимание на то, что волновые функции электрона, движущегося в кулоновском поле должным образом выбранного эффективного заряда, довольно хорошо аппроксимируют хартри-фовские волновые функции. Это приводит авторов [1, 2] к идее аппроксимации гамильтониана многоэлектронного атома суммой одночастичных гамильтонианов (в атомных единицах):

$$H = \sum_j \left(\frac{p_j^2}{2} - \frac{Z_j}{r_j} \right), \quad (1)$$

где каждый электрон имеет свой эффективный заряд. Волновая функция атома представляется как произведение кулоновских волновых функций отдельных электронов. Заполненные состояния определяются принципом Паули. (Оценки предлаваемой аппроксимации волновых функций тяжелых атомов см. в [2, 3].)

Простота этой модели позволяет надеяться, что ее использование для теоретической оценки свойств тяжелых атомов может оказаться эффективным. Однако ее непосредственное применение в форме (1) для расчета поляризуемостей тяжелых атомов не дает разумных результатов из-за того, что гамильтониан отдельного электрона в (1) обладает симметрией, ведущей к вырождению состояний с одинаковыми главными квантовыми числами и с разными значениями орбитального квантового числа (эти состояния принадлежат одному неприводимому представлению группы $O(4)$) и, например, к линейному эффекту Штарка. Эта симметрия отсутствует для электронов в тяжелых атомах. Тем не менее не следует полностью отказываться от главной идеи модели (1). Дело в том, что многолетние исследования теоретико-групповых аспектов периодической таблицы элементов (см. обзоры [4, 5]) ведут к заключению, что наиболее подходящей группой симметрии, представления которой определяют размер и последовательность периодов таблицы Менделеева, является группа $SO(4, 2)$ (а именно она и является группой динамической симметрии водородоподобного атома).

С точки зрения теоретико-группового анализа состояний электронов в атомах в модели независимых частиц центральной проблемой является такая перегруппировка состояний, которая теоретически обосновывала бы «лексикографическое упорядочение» Маделунга [6] по значениям $n + l$, n (n — главное квантовое число, l — орбитальное квантовое число). Однако среди операторов (1) нет такого, для которого собственным значением было бы число $n + l$ (да и не может быть, так как орбитальное квантовое число возникает из определения собственных значений оператора квадрата момента количества движения, т. е. не генератора какой-либо группы, а одного из операторов Казимира). Мы предлагаем чисто феноменологически учесть такую перегруппировку состояний добавлением к гамильтониану (1) слагаемого, содержащего оператор квадрата момента количества движения. При определенных значениях феноменологических параметров такого гамильтониана можно обнаружить полное соответствие порядка заполнения одноэлектронных состояний в нейтральных атомах характеру возрастания энергии, конкуренции (т. е. вырожденности) s -, p -, d -состояний. Использование такой модели позволяет заменить сложное определение поляризуемости всего атома вычислением суммы поляризуемостей независимых эффективных частиц, движение каждой из которых в постоянном электрическом поле, направленном вдоль оси Z , определяется оператором Гамильтона:

$$H_i = -\frac{1}{2}\Delta_i - \frac{\zeta}{r_i} + \frac{\omega d}{6r_i}\hat{l}_i^2 + (r_z)_i K, \quad i = 1 \dots Q, \quad (2)$$

где Δ — оператор Лапласа; ζ — эффективный заряд ядра; $\hat{l}_i$ — оператор момента количества движения; K — напряженность электрического поля; d и ω — параметры, значения которых будут определены далее; Q — число электронов в атоме.

Поляризуемость отдельного электрона есть коэффициент пропорциональности между наведенным дипольным моментом и напряженностью электрического поля. Определение скалярной поляризуемости одночастичной системы, находящейся в постоянном электрическом поле и описываемой гамильтонианом (2), эквивалентно вычислению собственных значений гамильтониана с точностью до второго порядка по K . Для этой цели удобно использовать операторный метод построения решений уравнения Шредингера, предложенный в [7, 8]. Этот метод высокоэффективен и особенно прост при реализации конкретных вычислений в тех случаях, когда оператор, собственные значения и собственные функции которого подлежат определению, является полиномиальным. Такая полиномиальная структура получается путем перехода от обычного трехмерного пространства к двумерному комплексному пространству (см. [7, 8]). Именно, в уравнении Шредингера, записанном в виде:

$$\left[-\frac{1}{2}r\Delta - Er - \zeta + \omega a \hat{l}^2 + r_z K r \right] \psi(r) = 0,$$

где $r = |r|$, E — собственное значение гамильтониана (2), $a = d/6$, индекс i опущен для удобства записи, осуществим формальные замены

$$r\Delta \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial \xi_s^* \partial \xi_s}, \quad r = \xi_s^* \xi_s, \quad x_i = \xi_s^* (\sigma_i)_{s1} \xi_1, \quad \lambda = 1, 2, 3, \quad s, t = 1, 2$$

и перейдем к уравнению

$$\left[\frac{\omega}{4} (2 + N - M^+ - M) - \zeta - \frac{E}{2\omega} (2 + N + M^+ + M) + \omega a \hat{l}^2 + \frac{K}{4\omega^2} (2 + N + M^+ + M) (m_3 + n_3 + m_3^+) \right] \psi(\xi_1^*, \xi_1, \xi_2^*, \xi_2) = 0, \quad (3)$$

где операторы N , M^+ , M , m_3^+ , m_3 , n_3 , $\hat{l}^2$ выражаются через операторы

$$a_s(\omega) = \left(\frac{\omega}{2} \right)^{1/2} \left(\xi_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi_s^*} \right),$$

$$b_s(\omega) = \left(\frac{\omega}{2}\right)^{1/2} \left(\xi_s + \frac{1}{\omega} \frac{\partial}{\partial \xi_s}\right)$$

и им эрмитовски сопряженные так же, как в [7], [8].

Полагая $E = E_0 + KE_1 + K^2E_2 + \dots$, определим параметр ω соотношением

$$E_0 = -\omega^2/2. \quad (4)$$

С учетом (4) оператор нулевого приближения, получаемый из уравнения (3) при $K=0$, принимает вид:

$$H_0 = \frac{\omega}{2} (2 + N) + \omega a \underline{1}^2 - \zeta. \quad (5)$$

Собственными функциями H_0 являются собственные функции водородоподобного атома $|klm\rangle$ (подробнее см. [8]), однако в отличие от водородоподобного атома собственные значения этого оператора являются невырожденными по l при $a \neq 0$:

$$E_0(n, l) = -\zeta^2/2[n + a l(l+1)]^2.$$

Здесь $n = k + 1$, m — магнитное квантовое число. Если положить $d-1$ ($a-1/6$), то можно обнаружить полное соответствие порядка заполнения одноэлектронных состояний в нейтральных атомах характеру возрастания энергии, конкуренции (т. е. вырожденности), s -, d -, f -состояний.

Используя стандартную теорию возмущений, находим из (3), (5):

$$E_1 = \frac{\langle klm | H_1 | klm \rangle}{\langle klm | H_2 | klm \rangle},$$

$$E_2 = - \frac{\langle klm | (E_1 H_2 - H_1) H_0^{-1} (E_1 H_2 - H_1) | klm \rangle}{\langle klm | H_2 | klm \rangle}, \quad (6)$$

где

$$H_1 = \frac{1}{4\omega^2} (2 + N + N + M^+) (m_3 + n_3 + m_3^+), \quad (7)$$

$$H_2 = \frac{1}{2\omega} (2 + N + M + M^+),$$

$$\langle klm | H_2 | klm \rangle = k + 1/\omega. \quad (8)$$

Нетрудно показать, что для любых k, l, m поправка первого порядка равна нулю. Следовательно, линейный эффект Штарка в данной модели отсутствует.

Из (6), (7), (8) следует

$$\begin{aligned} E_2(k, l, m) = & - \frac{1}{16(k+1)\omega} \langle klm | [4(1+k)^2 \times \\ & \times \{ m_3 H_0^{-1} m_3^+ + m_3^+ H_0^{-1} m_3 + n_3 H_0^{-1} n_3 \} + \\ & + 4(1+k) \{ m_3 H_0^{-1} n_3 M^+ + m_3^+ H_0^{-1} n_3 M + n_3 H_0^{-1} m_3^+ M + n_3 H_0^{-1} m_3 M^+ \} + \\ & + M m_3 H_0^{-1} m_3^+ M^+ + M^+ m_3^+ H_0^{-1} m_3 M + M m_3^+ H_0^{-1} m_3^+ M + M m_3^+ H_0^{-1} m_3 M^+ + \\ & + M^+ m_3 H_0^{-1} m_3 M^+ + M^+ m_3 H_0^{-1} m_3^+ M + M^+ n_3 H_0^{-1} n_3 M + \\ & + M n_3 H_0^{-1} n_3 M^+] | klm \rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

В (9) выписаны лишь члены, вклады которых не равны нулю.

После вычислений с применением перестановочных соотношений между используемыми в (9) операторами (см. [8]) получаем выражения, имеющие простую алгебраическую структуру, например:

$$\begin{aligned}
& \langle klm | m_3 H_0^{-1} m_3^+ | klm \rangle = \\
& = \frac{(1-m+1)(1+m+1)(k+1+2)(k+1+3)}{(2l+1)(2l+3)(\omega(2+k)+a(1+1)(1+2)-\zeta)} + \\
& + \frac{(1-m)(1+m)(k-1+2)(k+1+1)}{(2l+1)(2l-1)(\omega(2+k)+a(1-1)-\zeta)}.
\end{aligned}$$

Остальные слагаемые приводятся к аналогичному виду.

Формула (9) включает все возможные переходы между состояниями. Для того чтобы учесть принцип Паули, необходимо при расчетах исключить переходы на уже занятые уровни. С учетом этого были вычислены скалярные поляризуемости для атомов Ce и Nd в модели независимых частиц. Эффективный заряд определялся при помощи аппроксимации хартри-фоковской волновой функции 6s-оболочки волновой функцией 6s-состояния в водородоподобном атоме. Параметр d определялся из сравнения рассчитанной поляризуемости для атома Ba с экспериментальной. Предполагалось, что он одинаков для всех атомов, принадлежащих одной заполняемой оболочке (при одном и том же эффективном заряде энергия, соответствующая их внешним электронам, одинакова). Результаты расчетов отражены в таблице.

Скалярные поляризуемости атомов

Элемент		Поляризуемость α_{dip} а. е.		
номер	название	метод SCF [9]	эксперимент [10]	предлагаемый метод
56	Ba	334,8	241,54	241,54
58	Ce	330,0	—	230,00
60	Nd	299,1	—	222,60

При нахождении динамической поляризуемости многоэлектронного атома рассмотрим случай, когда внешнее электрическое поле, действующее на атом гармонически с частотой ν , зависит от времени и направлено вдоль оси OZ. Для определения вкладов отдельных независимых электронов в поляризуемость атома будем решать уравнение Шредингера (используем атомные единицы):

$$i \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{\zeta}{r} + \frac{\omega a \hat{l}^2}{r} \right) \psi(t) + r_z K \cos(\nu t) \psi(t). \quad (10)$$

Решение уравнения (10) ищем в виде:

$$\psi(t) = \psi_0(t) + \psi_1(t), \quad (11)$$

где

$$\psi_0(t) = \psi_0 e^{-iE_0 t}, \quad (12)$$

причем

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{\zeta}{r} + \frac{\omega a \hat{l}^2}{r} \right) \psi_0 = E_0 \psi_0. \quad (13)$$

Уравнение Шредингера с учетом (11), (12), (13) запишется:

$$\begin{aligned}
& i \frac{\partial \psi_1(t)}{\partial t} \left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{\zeta}{r} + \frac{\omega a \hat{l}^2}{r} \right) \psi_1(t) + \\
& + \frac{1}{2} r_z K \left(e^{-i(E_0 - \nu)t} + e^{-i(E_0 + \nu)t} \right) \psi_0.
\end{aligned} \quad (14)$$

Полагая в (14) $\psi_1(t) = \psi_1(t) + \chi_1(t)$,

$$\psi_1(t) = \psi_1 e^{-i(E_0 - \nu)t}, \quad \chi_1(t) = \chi_1 e^{-i(E_0 + \nu)t},$$

получим два уравнения:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\zeta}{r} + \frac{\omega a \hat{l}^2}{r} - (E_0 - \nu) \right) \varphi_1 + \frac{1}{2} K r_z \psi_0 = 0,$$

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{\zeta}{r} + \frac{\omega a \hat{l}^2}{r} - (E_0 + \nu) \right) \chi_1 + \frac{1}{2} K r_z \psi_0 = 0.$$

Решим первое из них. Имеем

$$\left(-\frac{1}{2} r \Delta - \zeta + \omega a \hat{l}^2 - (E_0 - \nu) r \right) \varphi_1 + \frac{1}{2} K r r_z \psi_0 = 0. \quad (15)$$

Введем обозначение

$$A = -\frac{1}{2} r \Delta - \zeta + \omega a \hat{l}^2 - (E_0 - \nu) r. \quad (16)$$

Представим оператор обратный A в виде:

$$A^{-1} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{-1}{i} \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t + i A t}, \quad (17)$$

где ε — положительный параметр, введенный для сходимости интеграла (17). В дальнейшем для простоты записи $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0}$ в формулах будем опускать.

Решение уравнения (15) с учетом (16), (17) запишется:

$$\varphi_1 = -\frac{1}{2i} K \int_0^{\infty} dt \exp \left\{ -\varepsilon t + i t \left[-\frac{1}{2} r \Delta - (E_0 - \nu) r - \zeta + \omega a \hat{l}^2 \right] \right\} r r_z \psi_0. \quad (18)$$

Используя преобразования, описанные в [8], приведем функцию (18) к виду:

$$\begin{aligned} \varphi_1 = & -\frac{1}{8i\omega^2} K \int_0^{\infty} dt e^{-\varepsilon t - i\gamma t} \exp \left\{ i \frac{\omega^2 + \nu}{\omega} t \right\} e^{\varepsilon} e^{\rho M^+} e^{\gamma N} \times \\ & \times e^{\rho M} e^{i\omega a \hat{l}^2} (2 + N + M + M^+) (m_3 + m_3^+ + n_3) |\psi_0\rangle, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha &= 2 \ln \frac{4\mu\omega \exp \left\{ -i \frac{(\mu + \omega)^2}{4\omega} t \right\}}{e^{-i\alpha t} (\mu + \omega)^2 - (\mu - \omega)^2}, \\ \beta &= \frac{(\mu^2 - \omega^2) (1 - e^{-i\alpha t})}{e^{-i\alpha t} (\mu + \omega)^2 - (\mu - \omega)^2}, \end{aligned} \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \gamma &= \ln \frac{4\mu\omega \exp \left\{ -\frac{i}{2} \mu t \right\}}{e^{-i\alpha t} (\mu + \omega)^2 - (\mu - \omega)^2}, \\ \mu &= (\omega^2 + 2\gamma)^{1/2}, \quad E_0 = -\frac{1}{2} \omega^2, \end{aligned}$$

$$|\psi_0\rangle = |klm\rangle. \quad (21)$$

В первом приближении теории возмущений проекция на ось OZ среднего индуцированного электрического момента электрона, волновая функция невозмущенного состояния которого имеет вид (21), определяется матричным элементом

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | r r_z | \varphi_1 \rangle &= \langle klm | r r_z | \varphi_1 \rangle = \\ &= \frac{1}{4\omega^2} \langle klm | (2 + N + M + M^+) (m_3 + m_3^+ + n_3) | \varphi_1 \rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

Подставляя (19) в (22) и применяя полученные в [8] правила вычисления матричных элементов операторов N, M, M⁺, m₃, m₃⁺, n₃ на

функциях $|klm\rangle$, после несложных преобразований можно представить матричный элемент (22) в виде интеграла по t от выражения, имеющего чисто алгебраическую структуру.

Тензор динамической поляризуемости одноэлектронного атома $\alpha = (\alpha_{ik})$, где $i, k = r_x, r_y, r_z$, в рассматриваемом состоянии $|klm\rangle$ находится следующим образом:

$$\alpha_{zz} = -\frac{2}{E} \langle \psi_0 | r_z | \phi_1 \rangle, \quad \alpha_{xz} = -\frac{2}{E} \langle \psi_0 | r_x | \phi_1 \rangle, \quad \alpha_{yz} = -\frac{2}{E} \langle \psi_0 | r_y | \phi_1 \rangle.$$

В заключение необходимо отметить, что предложенный вариант модели независимых частиц впервые уже в нулевом приближении предсказывает правильное расположение элементов в периодической таблице Менделеева. Его использование привело к возможности применения Операторного метода при проведении анализа многочастичных систем, в частности, позволило получить общие формулы для расчета статической и динамической поляризуемостей атомов тяжелых элементов. На их основе вычислены значения скалярных статических поляризуемостей атомов церия и неодима. В дальнейшем возможно применение данной модели для расчета ионизационных потенциалов, энергетических уровней, тензорных поляризуемостей атомов.

1. K r e g a r M., W e i s s k o p f V. F. // Am. J. Phys. 1982. V. 50. P. 213.
2. K r e g a r M. // Physica Scripta. 1984. V. 29. P. 438.
3. Ibid. 1985. V. 31. P. 246.
4. N o v a r o O. // Journ. of Molecular Structure. TheoChem. 1989. V. 199. P. 103.
5. Ф е т А. И. // Мат. моделирование в биологии и химии: Новые подходы. Новосибирск, 1992. С. 118.
6. М а д е л у н г Э. Математический аппарат физики. М., 1961.
7. К о м а р о в Л. М., Р о м а н о в а Т. С. // Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. наук. 1982. № 2. С. 98.
8. К о м а р о в Л. И., Р о м а н о в а Т. С., Ч а н З а А н // Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. наук. 1987. № 1. С. 90.
9. T e a c h o u t R. R., P a c k R. T. // Atomic Data. 1971. V. 3. P. 195.
10. S c h w a r t z H. L., M i l l e r T. M. and B e d e r s o n B. // Phys. Rev. A. 1974. V. 10. P. 1924.

Поступила в редакцию 18.03.94.

УДК 535:538.56

Л. М. БАРКОВСКИЙ, В. В. ЖИЛКО, А. В. ЛАВРИНЕНКО

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИХ ПРИЗМЕННЫХ МОДУЛЯТОРОВ СВЕТА ДЛЯ ЛИНЕЙНЫХ И КОЛЬЦЕВЫХ РЕЗОНАТОРОВ

The dependences of transmission coefficients of the two types of KDP, DKDP and LiNbO₃ electrooptic prism modulators on the voltage and temperature are calculated.

Широкое распространение оптических средств связи, прогресс оптического приборостроения, развитие лазерной техники обуславливают значительный интерес к проблеме использования света для обработки и преобразования оптической информации. Применение современных электронных и оптических схем, использование высококогерентных источников света привело к повышению точности и чувствительности измерений параметров световых пучков, что необходимо для решения многих научных и прикладных задач. Вследствие этого повышаются требования к характеристикам различных оптических элементов и оптических каналов на их основе. Естественно поэтому расчет таких каналов проводить в соответствии со строгой теорией распространения электромагнитных волн в многослойных анизотропных структурах [1—3]. В настоящей работе проведен анализ характеристик пропускания двух вариантов электрооптических призмных модуляторов (ЭПМ) из кристаллов KDP, DKDP и LiNbO₃, используемых для модуляции добротности линейных и кольцевых резонаторов. На рис. 1 кристаллофизическая ось Z направлена вдоль оптической оси невозмущенного кристалла. В центральной части кристалла пунктиром обозначена область, в которой под воздействием прикладываемого напряжения наводится двуосность.

Первый вариант ЭПМ (рис. 1, а) применяется в линейных резонаторах [4]. Он представляет собой призму с четырьмя попарно параллельными рабочими гранями. Чтобы избежать потерь излучения при отражении, свет падает на входную грань под углом Брюстера, определяемом из соотношения [5]:

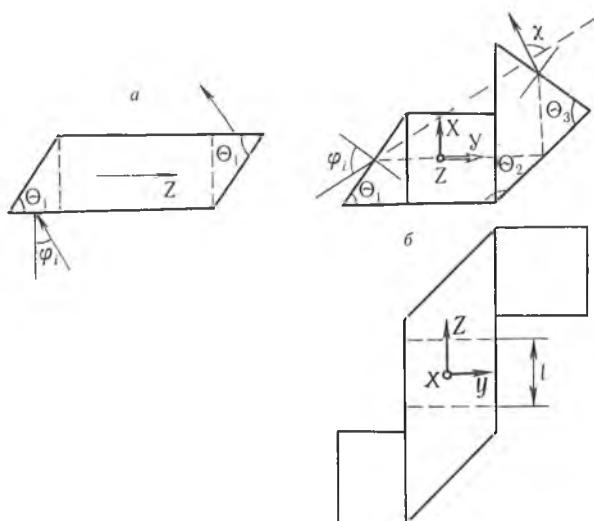


Рис. 1. ЭПМ с четырьмя попарно параллельными рабочими гранями (а); ЭПМ с пятью рабочими гранями (б); ψ_1 — угол падения; l — длина управляемой области; θ_i — углы наклона граней

$$\operatorname{tg}^2 \phi_1 = \epsilon_0 (\epsilon_e - 1) / (\epsilon_0 - 1), \quad (1)$$

где ϵ_0 , ϵ_e — главные значения тензора диэлектрической проницаемости одноосного кристалла. Из рисунка видно, что плоскость падения является главной плоскостью. Угол θ_1 между первой и второй (пятой и шестой) гранями ЭПМ рассчитывается таким образом, чтобы выходящий световой пучок был параллелен (с определенной точностью) падающему. Путем несложных вычислений получаем:

$$\theta_1 = \operatorname{arccctg} \frac{\sqrt{\epsilon_0 \epsilon_e - 1} \pm \sqrt{\epsilon_e - 1}}{\sqrt{\epsilon_0 (\epsilon_0 - 1)}}, \quad (2)$$

где верхний знак соответствует призме, вырезанной из кристаллов KDP, DKDP, нижний — призме из ниобата лития.

Частотная и температурная зависимость главных значений ϵ_0 , ϵ_e тензора диэлектрической проницаемости кристаллов KDP и DKDP учитывались с помощью данных [6], а температурная зависимость электрооптического коэффициента r_{63} — по [7]. Изменение линейных размеров и ориентации граней призмы при вариациях температуры рассчитывались аналогично [3]. Для учета частотной и температурной зависимостей главных значений тензора диэлектрической проницаемости кристалла LiNbO_3 использовались зависимости $\epsilon_0(\lambda, T)$, $\epsilon_e(\lambda, T)$ [8]. Изменение линейных размеров ЭПМ из ниобата лития рассчитывается по [8, 9]:

$$d = d_0 (1 + \alpha(T - T_0) + \beta(T - T_0)^2), \quad (3)$$

где $T_0 = 293\text{K}$; d_0 — линейный размер при температуре T_0 ; α и β — коэффициенты линейного расширения. Зависимость угла θ_1 от температуры вычислялась следующим образом:

$$\theta_1(T) = \operatorname{arctg} \frac{1 + \alpha_1(T - T_0) + \beta_1(T - T_0)^2}{1 + \alpha_{||}(T - T_0) + \beta_{||}(T - T_0)^2} \operatorname{tg} \theta_1, \quad (4)$$

где $\alpha_{||} = 0,75 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$; $\beta_{||} = -7,7 \cdot 10^{-9} \text{K}^{-2}$; $\alpha_1 = 1,54 \cdot 10^{-5} \text{K}^{-1}$;

$\beta_{\perp} = 5,3 \cdot 10^{-9} \text{K}^{-2}$ — коэффициенты линейного расширения в направлении, параллельном и ортогональном оптической оси соответственно.

При этом углы Θ_1 и $\varphi_1^{\text{бр}}$ вычислялись для температуры $T_0 = 293 \text{ K}$, длины волны $\lambda_0 = 0,6943 \text{ мкм}$ для KDP и $\lambda_0 = 1,06 \text{ мкм}$ для DKDP и ниобата лития. Получаем следующие наборы углов:

$$\begin{aligned} \varphi_1^{\text{бр}} &= 55,10^\circ, & \Theta_1 &= 29,14^\circ & \text{для кристалла KDP,} \\ \varphi_1^{\text{бр}} &= 54,93^\circ, & \Theta_1 &= 28,99^\circ & \text{для кристалла DKDP,} \\ \varphi_1^{\text{бр}} &= -64,87^\circ, & \Theta_1 &= 57,97^\circ & \text{для кристалла LiNbO}_3. \end{aligned}$$

Знак «—» для угла Брюстера в последнем случае говорит о том, что свет падает с другой стороны нормали к границе раздела в точке падения.

Для ЭПМ из кристаллов KDP, DKDP на шестой (выходной) границе призмы в общем случае формируется центральный пучок, параллельный падающему и состоящий из двух линейно поляризованных ортогональных компонент, и два боковых пучка, поляризованных во взаимно ортогональных плоскостях. При помощи алгоритма [1, 2] были рассчитаны зависимости пропускания ЭПМ от управляющего напряжения для различных температур и различных размеров управляемой области. Для компоненты, поляризованной перпендикулярно плоскости падения, максимальное пропускание $D_{\perp \text{max}}$ составляет 0,75, в то время как для поляризационной компоненты, параллельной плоскости падения, максимальное пропускание $D_{\parallel \text{max}} = 1,00$.

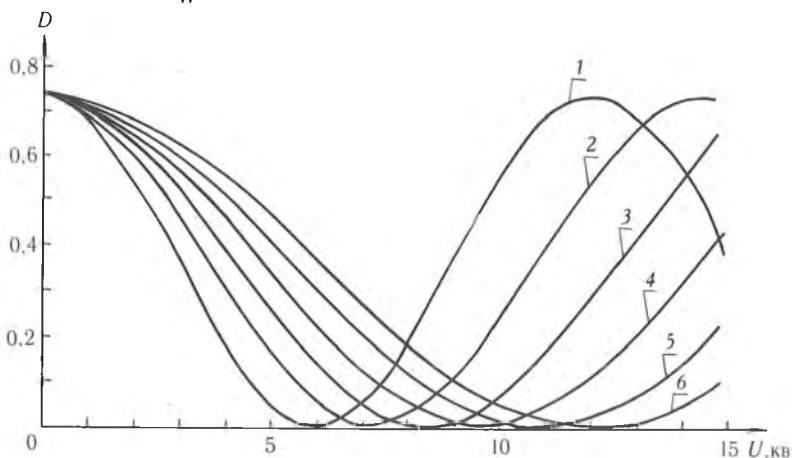


Рис. 2. Зависимость коэффициента пропускания необыкновенной волны ЭПМ из кристалла KDP от управляющего напряжения для различных температур:
1 — $t = -40^\circ \text{C}$; 2 — $t = -20^\circ \text{C}$; 3 — $t = 0^\circ \text{C}$; 4 — $t = +20^\circ \text{C}$; 5 — $t = +40^\circ \text{C}$; 6 — $t = +60^\circ \text{C}$; $\lambda = 0,6943 \text{ мкм}$, $l = 2 \text{ мм}$

На рис. 2 приведены зависимости пропускания ЭПМ из кристалла KDP для волны, поляризованной перпендикулярно плоскости падения при различных температурах.

Рассмотрено влияние отклонений угла Θ_1 от значения, рассчитанного по формуле (2). При отклики угла Θ_1 от расчетного на величину, лежащую в пределах $\pm 0,5^\circ$, это влияние незначительно, но при больших изменениях оно заметно сказывается на пропускании модулятора.

На шестой границе ЭПМ из LiNbO_3 формируются два параллельных центральных пучка, поляризованных во взаимно перпендикулярных областях, и два боковых пучка, также поляризованных во взаимно ортогональных плоскостях. В отличие от кристаллов KDP и DKDP, ЭПМ из кристалла LiNbO_3 работает на поперечном электрооптическом эффекте (электрическое поле прикладывается вдоль кристаллофизической оси X). В этом случае электрооптический эффект определяется электрооптическими коэффициентами r_{22} и r_{51} . Согласно [7], коэффициент r_{22} вплоть до 100°C от температуры не зависит, а его зависимость от длины волны вычислялась из соотношения, определенного по [10]: $r_{22} = 3,8083 + 1,8304/\lambda$.

Коэффициент τ_{51} считался независимым от температуры и длины волны, поскольку в справочной литературе отсутствуют данные о его частотной и температурной дисперсии.

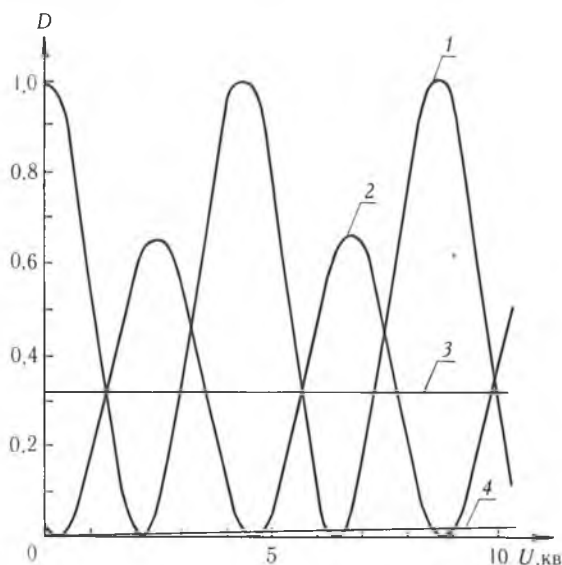


Рис. 3. Зависимость пропускания ЭПМ из кристалла ниобата лития от управляющего напряжения:
1, 4 — обычные волны; 2, 3 — необыкновенные волны; $l = 1,06$ мкм, $t = +20^\circ\text{C}$

На рис. 3 приведены графики зависимостей коэффициентов пропускания модулятора из кристалла LiNbO_3 для центральных и боковых пучков от управляющего напряжения. Пропускание центрального пучка, поляризованного перпендикулярно плоскости падения, практически не зависит от приложенного электрического поля (кривая 3 на рис. 3).

Второй вариант ЭПМ представлен на рис. 1, б (в прямоугольных проекциях). Модулятор поворачивает оптическое излучение на определенный угол χ относительно первоначального направления распространения. В связи с наличием в призме управляемой области, в которой под воздействием прикладываемого напряжения происходит модуляция интенсивности проходящего излучения, призма может действовать одновременно как затвор и как зеркало, поворачивающее излучение в резонаторе. Рассматривались два случая, когда угол $\chi = 90^\circ$ и $\chi = 60^\circ$. Изменить угол χ можно соответствующим подбором углов Θ_2 и Θ_3 . Так как изменение углов Θ_2 и Θ_3 не затрагивает управляемую область, рассчитанные зависимости коэффициентов пропускания волн, поляризованных параллельно и перпендикулярно плоскости падения, относятся в равной степени к ЭПМ, поворачивающим излучение как на 90° , так и на 60° .

Ввод оптического излучения в призму осуществляется под углом Брюстера. Угол Θ_1 выбирается таким образом, чтобы после преломления на входной границе обычные лучи шли вдоль кристаллофизической оси Y. В этом случае при полном отражении на второй границе, расположенной под углом 45° к плоскости XZ (см. рис. 1, б), обыкновенная волна распространяется вдоль оси Z. Тем самым создается возможность для наиболее эффективного управления излучением. Из геометрических построений на первой границе можно получить равенство $\Theta_1 = \varphi$. Углы Θ_2 и Θ_3 находятся из условия, что излучение должно выходить из ЭПМ под углом χ к направлению распространения падающего излучения. В общем случае имеем

$$\Theta_1 = \pi - \frac{\chi + \varphi_1 + \alpha_7 - \alpha_1 + \varphi_d}{2}, \quad (5)$$

где α_1 — угол преломления на первой границе; α_7 — угол падения на последнюю, седьмую, грань; φ_d — угол преломления на седьмой границе. Углы φ_1 и α_1 , а также φ_d и α_7 связаны законом преломления:

$$\frac{\sin \psi_1}{\sin \alpha_1} = \frac{\sin \psi_d}{\sin \alpha_7}$$

Вместе с тем, чтобы система обладала взаимностью, угол выхода излучения также должен быть равен углу Брюстера, т. е. $\varphi_d = \varphi_1$. Следовательно, $\alpha_1 = \alpha_7$ и из (3) получаем

$$\Theta_2 = \pi - \chi/2; \quad \Theta_3 = \Theta_2 - \Theta_1.$$

Ввиду того, что направление распространения излучения между второй и пятой границами незначительно отличается от направления, задаваемого осью Z, значение угла Θ_3 было уточнено уже при непосредственном вычислении параметров выходящего излучения, в частности угла χ . Окончательно были получены следующие наборы углов, которые и использовались в численных расчетах:

1. ЭПМ из кристалла DKDP, угол $\chi = 90^\circ$; $\Theta_1 = 56^\circ 17'$, $\Theta_2 = 135^\circ$, $\Theta_3 = 78^\circ 77'$.
2. ЭПМ из кристалла DKDP, угол $\chi = 60^\circ$; $\Theta_1 = 56^\circ 17'$, $\Theta_2 = 150^\circ$, $\Theta_3 = 93^\circ 77'$.
3. ЭПМ из кристалла KDP, угол $\chi = 90^\circ$; $\Theta_1 = 56^\circ 40'$, $\Theta_2 = 135^\circ$, $\Theta_3 = 78^\circ 60'$.
4. ЭПМ из кристалла KDP, угол $\chi = 60^\circ$; $\Theta_1 = 56^\circ 40'$, $\Theta_2 = 150^\circ$, $\Theta_3 = 93^\circ 60'$.

При этих значениях углов Θ_1 , Θ_2 , Θ_3 точность достижения требуемого значения угла χ была выше $0^\circ,01$.

При расчетах учитывалась частотная и температурная зависимости тензора диэлектрической проницаемости кристаллов KDP, DKDP, температурная зависимость электрооптического коэффициента, изменение линейных размеров и ориентации граней призмы при вариациях температуры [3].

В общем случае произвольной поляризации падающей волны на выходе имеется четыре поляризованных пучка: два основных (центральных) и два боковых, причем основные пучки поляризованы параллельно и перпендикулярно плоскости падения. Плоскости поляризации боковых пучков немного отличаются от плоскостей поляризации основных пучков. При приложении управляющего напряжения интенсивность основных пучков уменьшается, а боковых растет.

В качестве примера на рис. 4 приведена одна из зависимостей коэффициента пропускания центрального пучка, поляризованного перпендикулярно плоскости падения, от приложенного напряжения для различных температур. Отметим, что поворот кристаллофизического базиса вокруг оси Z ухудшает глубину модуляции центральных световых пучков, как и для ЭПМ первого типа.

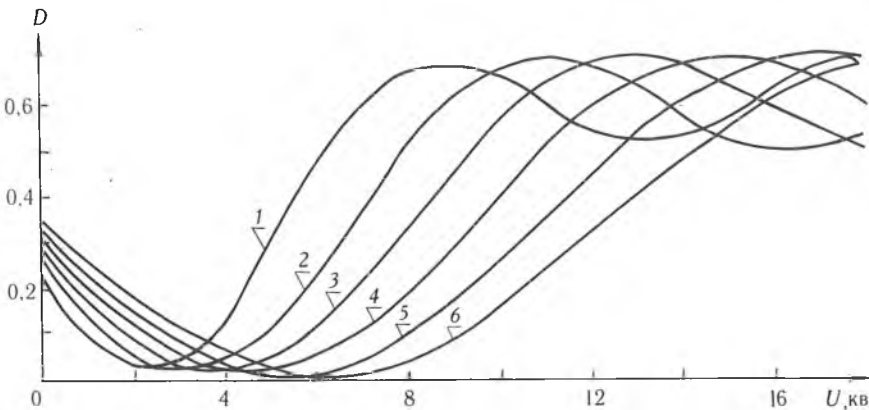


Рис. 4. Зависимость коэффициента пропускания необыкновенной волны ЭПМ из кристалла KDP от управляющего напряжения для различных температур: 1 — $t = -50^\circ\text{C}$; 2 — $t = -30^\circ\text{C}$; 3 — $t = -10^\circ\text{C}$; 4 — $t = +10^\circ\text{C}$; 5 — $t = +30^\circ\text{C}$; 6 — $t = +50^\circ\text{C}$; $\lambda = 0,6943$ мкм, $l = 10$ мм

Таким образом, рассчитаны два варианта электрооптических призм и показана возможность их эффективного использования в качестве внутривиброизонаторных модуляторов лазерного излучения в широком спектральном и температурном диапазонах.

1. Федоров Ф. И. и др. // Вестн АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1982. № 3. С. 59.
 2. Там же. № 4. С. 49.
 3. Барковский Л. М. и др. // ОМП. 1990. № 9. С. 22.
 4. Камач Ю. Э. и др. // Квантовая электроника. 1978. Т. 5. № 7. С. 1435.
 5. Федоров Ф. И., Филиппов В. В. Отражение и преломление света прозрачными кристаллами. Мн., 1976.
 6. Ghosh G. C., Bhargava G. C. // IEEE Journ. Quant. Electron. 1982. V. QE-18. № 2. P. 143.
 7. Сонин А. С., Василевская А. С. Электрооптические кристаллы. М., 1971.
 8. Кузьминов Ю. С. Электрооптический и нелинейнооптический кристалл ниобата лития. М., 1987.
 9. Kim Y. S., Smith R. T. // Journ. Appl. Phys. 1969. V. 40. № 11. P. 4637.
 10. Landolt-Börnstein. Zahlenwerte und Funktionen aus Naturwissenschaften und Technik. Neue Serie. Gruppe 3: Kristall und Festkörperphysik. Berlin, 1969.
- Поступила в редакцию 17.01.94.

УДК 621.039

Ю. И. ДУДЧИК, Ф. Ф. КОМАРОВ, Я. А. КОНСТАНТИНОВ

ИССЛЕДОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ В ПЛАНАРНЫХ ВОЛНОВОДАХ

The X-ray waveguide is a new element of the X-ray apparatus. We have investigated the propagation of the characteristic radiation of Mo and Re atoms through the planar X-ray waveguides. One of the possible systems for scanning objects by the X-ray beam on the basis of the planar waveguides is proposed.

Исследованы рентгенооптические характеристики бинарных и многослойных планарных волноводов, а также рассмотрено их применение в устройствах рентгеновской техники.

Рентгеновский волновод представляет собой устройство, содержащее достаточно длинную полость, ограниченную плотной средой с гладкой поверхностью. Рентгеновские лучи направлены распространяются в канале, последовательно отражаясь от стенок под малыми скользящими углами.

Среди планарных волноводов можно выделить бинарные, состоящие из двух полированных пластин, прижатых друг к другу, и многослойные, которые образуются посредством нанесения на гладкую подложку чередующихся слоев легкого и тяжелого материалов, например алюминия и тантала или углерода и вольфрама. В данном случае роль волноводного канала играют слои легкого материала, а слои тяжелого материала служат отражателями.

Работа рентгеновода основана на явлении полного внешнего отражения рентгеновских лучей.

Показатель преломления среды n в рентгеновском диапазоне длин волн вдали от полос поглощения можно представить в виде:

$$n = 1 - \frac{\omega_p^2}{2\omega^2} - i\beta, \quad (1)$$

где ω_p — плазменная частота колебаний электронов в среде, β — мнимая часть показателя преломления, ω — частота падающего излучения.

Полное внешнее отражение рентгеновских лучей наблюдается при углах скольжения меньших критического угла полного внешнего отражения Θ_c , где $\Theta_c = \omega_p/\omega$. Наличие поглощения в отражающей среде приводит к тому, что коэффициент отражения R отличается от единицы на величину ΔR [1], где

$$\Delta R = \frac{4\beta}{\Theta_c^2 [(\Theta_c/\Theta)^2 - 1]^{1/2}}, \quad (2)$$

для углов скольжения $\Theta < \Theta_c(1 - 2(\beta/\delta)^2)$, а $\delta = \frac{\omega_p^2}{2\omega^2}$.

Возможность практического использования волноводов в рентгеновской технике связана с тем фактом, что их применение позволяет в ряде случаев повысить интенсивность излучения на мишени, при этом выбор

материала отражателя производится в соответствии с соотношением (1) так, чтобы коэффициент отражения для данной длины волны излучения не отличался от единицы на величину большую чем 0,01—0,05.

Для характеристики эффективности использования волноводов в том или ином случае можно ввести параметр $\eta = \Theta_c^2/\Omega$, показывающий, какое увеличение интенсивности на мишени можно ожидать в случае применения волновода, помещенного между источником излучения и мишенью, где Ω — телесный угол мишени из места расположения источника, а Θ_c — критический угол полного внешнего отражения.

В некоторых случаях перспективно использование изогнутых волноводов, которые позволяют существенно увеличить угол сбора излучения от источника или изменить направление распространения рентгеновского излучения. Рентгеновские лучи направленно распространяются в таком волноводе только в том случае, когда радиус его изгиба превышает некоторое значение $r_c = \frac{2d}{\Theta_c^2}$, где d — размер волноводного канала. Такой

волновод, имеющий длину l , обеспечивает поворот рентгеновского излучения на угол $\Theta = \frac{l\Theta_c^2}{2d}$, хотя с ростом l и уменьшением r происходит существенное ослабление интенсивности «повернутого» излучения.

Работа волноводных структур в рентгеновском диапазоне спектра возможна только в том случае, когда их рабочая поверхность достаточно гладкая. Критерий Рэлея, основывающийся на требовании, чтобы разность хода лучей, отраженных от вершины и основания неровности, не превышала четверти длины волны падающего рентгеновского излучения, дает следующее выражение допустимой высоты шероховатостей поверхности (в предположении малости угла падения): $h = \lambda/8\Theta$.

Из этого выражения следует, что, например, для рентгеновского излучения с длиной волны 0,16 Å (энергия порядка 80 кэВ) и угла падения 0,05° допустимая шероховатость поверхности составляет 23 Å. Это требование является достаточно жестким, хотя в литературе описаны технологии получения сверхгладких поверхностей с высотой шероховатости 1—10 Å [2].

В настоящей работе в качестве стенок бинарных волноводов, а также подложек для многослойных волноводов использовались стандартные кремниевые пластины, применяемые в микроэлектронике. Как показал опыт, степень гладкости этих пластин достаточно высокая для того, чтобы наблюдать волноводное распространение рентгеновского излучения. Путем нанесения тонких пленок различных материалов на рабочие поверхности пластин можно изменять рентгенооптические свойства волноводов, чтобы добиться максимального пропускания волновода для выбранного рабочего диапазона длин волн.

Рассмотрим систему для сканирования объектов рентгеновским пучком [3], состоящую из рентгеновской трубки и линейки детекторов. Предлагаем изменить описанную схему, поместив планарный рентгеновский волновод между источником излучения и исследуемым объектом (рис. 1, вставка). Эффективность использования данной системы можно приблизительно оценить, исходя из следующего. Если угол захвата излучения в волноводный режим распространения Θ_c превосходит угол детектора α , можно ожидать усиление интенсивности в Θ_c/α раз.

Число фотонов, прошедших через волновод N , определяется по формуле:

$$N = N_0 [R(\hbar\omega, \Theta)]^{M(\Theta, d, l)}, \quad (3)$$

где N_0 — число фотонов падающих на вход волновода под углом Θ по отношению к стенкам волновода, R — коэффициент отражения фотонов с энергией $\hbar\omega$, M — число отражений, претерпеваемых фотонами в канале волновода длиной l и поперечным размером d .

Коэффициент отражения R можно рассчитать по формуле Френеля:

$$R = \left| \frac{\sin \Theta - (\epsilon - \cos \Theta)^{1/2}}{\sin \Theta + (\epsilon - \cos \Theta)^{1/2}} \right|^2, \quad (4)$$

где ϵ — диэлектрическая проницаемость материала отражателя.

На рис. 1 показано рассчитанное по формуле (3) спектральное распределение интенсивности рентгеновского излучения на детекторе для схемы, изображенной на вставке к рис. 1. Источник рентгеновского излучения — трубка с вольфрамовым анодом. При расчетах использовались следующие параметры системы: размер фокусного пятна $0,5 \times 10$ мм; длина волновода 800 мм. Перед детектором установлена горизонтальная щель размером 0,5 мм. Расстояние от рентгеновского источника до волновода 100 мм; от конца волновода до детектора 600 мм. Кривая 1(рис. 1) показывает рассчитанный спектр излучения на детекторе без волновода [4], а кривые 2 и 3 — энергетическое распределение рентгеновских фотонов, прошедших через волновод, канал которого имеет размер 0,5 и 0,1 мм соответственно. Из рисунка видно, что, оптимизируя ширину волноводного канала, можно добиться значительного увеличения интенсивности рентгеновского излучения на детекторе.

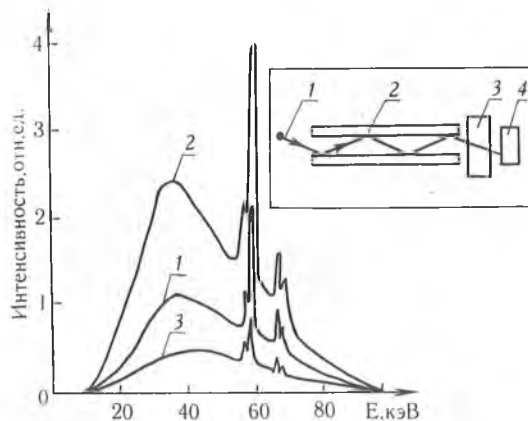


Рис. 1. Рассчитанное энергетическое распределение рентгеновских фотонов на детекторе для схемы на вставке:

1 — спектр источника без волновода; 2 — канал волновода 0,5 мм; 3 — канал волновода 0,1 мм. Вставка — схема системы сканирования объектов рентгеновским излучением: 1 — источник рентгеновского излучения; 2 — волновод; 3 — исследуемый объект; 4 — детектор

Как следует из (3), пропускание волноводов для определенной энергии фотонов зависит от их угла скольжения относительно стенок волноводного канала, а также от геометрических параметров l и d . Поэтому в данной работе угловая зависимость пропускания волноводов для характеристических фотонов К-серии атомов молибдена и рения исследовалась экспериментально.

Для экспериментов были использованы волноводы, образованные кремниевыми пластинами и такими же пластинами с нанесенным на них слоем вольфрама. В качестве источника рентгеновского излучения использовался рентгеновский излучатель с прострельным анодом РЕЙС-100. В эксперименте применялись трубки с молибденовым и рениевым анодами. Напряжение на трубке 80—90 кВ, анодный ток 30—40 μ А. Щелевой коллиматор после трубки вырезал рентгеновский пучок шириной 50 μ м. Излучение детектировалось сцинтилляционным детектором на основе кристалла NaI. Энергетическое распределение рентгеновских фотонов анализировалось 1024-канальным анализатором импульсов. Угол между падающим рентгеновским пучком и плоскостью волновода определялся с точностью 0,005°.

На рис. 2,а показана измеренная зависимость интенсивности фотонов K_{α} линии молибдена, прошедших через волновод, от угла падения пучка к плоскости волновода (угол качания). Кривая 1 соответствует волноводу, образованному пластинами кремния, кривая 2 — пластинами кремния с нанесенным на них слоем вольфрама. Длина волновода 95 мм, размер волноводного канала 3 μ м.

Аналогичная зависимость измерялась для фотонов K_{α} линии атомов рения.

Теоретическое описание полученных результатов проводилось с учетом влияния на отражение рентгеновских лучей неровностей стенок волноводного канала. Расчет отражения рентгеновских лучей от шероховатой поверхности был выполнен в соответствии с моделью, предложенной в работе [5].

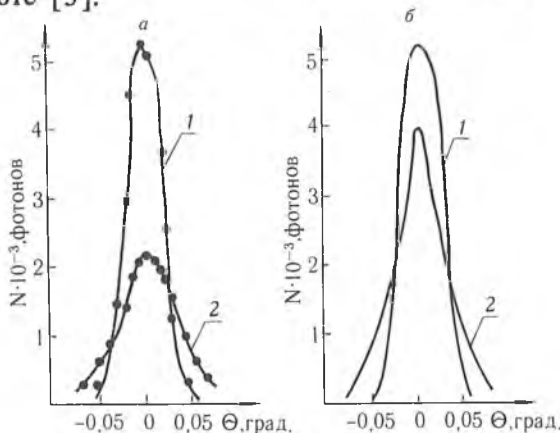


Рис. 2. Число фотонов, прошедших через волновод, как функция угла качания Θ для Mo K_α -излучения: эксперимент (а); теория (б); 1 — кремниевый волновод; 2 — вольфрамовый волновод

Выбрав координатную систему, где идеально гладкая поверхность совпадает с плоскостью $Z = 0$, распределение диэлектрической проницаемости для идеально гладкой поверхности можно записать в виде:

$$\epsilon = \begin{cases} 1, & z < 0 \\ \epsilon_0, & z > 0. \end{cases} \quad (5)$$

Высота реальной поверхности над плоскостью $Z = 0$ описывается случайной функцией $\xi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{q} = (x, y)$. Распределение диэлектрической проницаемости для реальной поверхности имеет вид:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \epsilon_0(z) + \Delta\epsilon(\mathbf{r}), \quad (6)$$

$$\Delta\epsilon(\mathbf{r}) = (1 - \epsilon_0)[H(z) - H(z - \xi(\mathbf{q}))], \quad (7)$$

где $H(z)$ — ступенчатая функция Хэвисайда.

Решая волновое уравнение для распределения диэлектрической проницаемости $\epsilon(\mathbf{r})$:

$$[\nabla^2 + k^2\epsilon_0(z)]E(\mathbf{r}) = -k^2\Delta\epsilon(\mathbf{r})E(\mathbf{r}), \quad (8)$$

где k — волновой вектор, можно получить выражение для коэффициента зеркального отражения от шероховатой поверхности, имеющего вид:

$$R = R_0 - \delta R, \quad (9)$$

где R_0 — коэффициент отражения от идеально гладкой поверхности.

Для расчета коэффициента отражения необходимо усреднить выражение для $E(\mathbf{r})$ по всем возможным реализациям функции $\xi(\mathbf{q})$. Шероховатая поверхность характеризуется корреляционной функцией высот поверхностных шероховатостей $X(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle \xi(\mathbf{q})\xi(\mathbf{q}') \rangle$, которая определяется двумя параметрами — среднеквадратичной высотой поверхностных шероховатостей $\xi^2 = \langle \xi^2(\mathbf{q}) \rangle$ и радиусом корреляции d .

Если энергия излучения достаточно велика, имеет смысл рассматривать только малые углы скольжения рентгеновского излучения относительно поверхности. В этом случае при условии, что корреляционный радиус достаточно мал, выражение для δR имеет вид:

$$\delta R = 2k^2\xi^2\sqrt{ka}(1 - \epsilon_0)\Theta. \quad (10)$$

На основе описанной модели был проведен расчет зависимости интенсивности фотонов K_α линии Mo , прошедших через волновод, от угла между падающим пучком и плоскостью волновода (рис. 2, б). Кривая 1

соответствует волноводу, образованному пластинами кремния, кривая 2 — пластинами кремния с нанесенным на них слоем вольфрама. Длина волновода 95 мм, размер волноводного канала — 3 μm . Радиус корреляции высот поверхностных шероховатостей и среднеквадратичная высота шероховатостей выбраны равными: $a = 7000 \text{ \AA}$, $\xi = 4 \text{ \AA}$.

При сравнении рис. 2,б и рис. 2,а видно, что имеется хорошее соответствие в характерах поведения экспериментальных и теоретических кривых.

Как уже отмечалось, наряду с бинарными планарными волноводами можно рассматривать многослойные волноводы, состоящие из чередующихся слоев двух материалов с различными атомными весами. Предполагается, что излучение распространяется в слое «легкого» материала, последовательно отражаясь от слоев «тяжелого» материала.

Основное отличие многослойных структур от капилляров и бинарных волноводов состоит в возможности формирования волноводных слоев толщиной от 10 до 100 нм. Как показано в [6, 7], такие структуры могут поддерживать дискретное число мод, что позволяет говорить о создании на их основе устройств интегральной рентгеновской оптики.

Эксперименты проводились с многослойными волноводами, состоящими из чередующихся слоев тантала и алюминия, нанесенных методом ионно-плазменного распыления на кремниевую подложку [8]. Толщина слоя алюминия — 60 нм, толщина слоя вольфрама — 30 нм. Длина структуры — 5 мм.

Схема экспериментальной установки аналогична использованной для бинарных волноводов.

Для фокусировки излучения на торец многослойной структуры, имеющей размер порядка 22,5 мкм (250 пар слоев), использовался волноводный коллиматор, позволяющий получать пучки рентгеновского излучения микронных размеров. Коллиматор состоял из двух прижатых друг к другу кремниевых пластин. На одной из них располагалась многослойная структура, предварительно сформированная методом ионно-плазменного распыления. Для сравнения результатов также исследовалось прохождение излучения через указанный коллиматор и расположенную за ним алюминиевую пластину, длина которой совпадала с длиной многослойной структуры.

В результате проведения экспериментов были получены зависимости интенсивности фотонов K_{α} линии атомов молибдена, прошедших через многослойный волновод и алюминиевый поглотитель, от угла качания. Полученные кривые по форме напоминают кривые, представленные на рис. 2 с несколько меньшей полушириной. При этом интенсивность рентгеновского пучка, прошедшего через многослойный волновод, по порядку величины сравнима с интенсивностью пучка, прошедшего через алюминиевый поглотитель. Этот факт не согласуется с оценками интенсивности излучения на выходе многослойных волноводов, так как из-за большого числа отражений в канале на длине 5 мм (100 и более отражений) должно наблюдаться значительное ослабление рабочего пучка. Одной из причин расхождения расчетов с экспериментальными данными, по-видимому, являются то, что при моделировании не был учтен вклад рассеянного на плоскостях структуры излучения в суммарный выход.

Полученные результаты свидетельствуют о перспективности практического использования нового элемента рентгеновской техники — волновода — не только в мягком диапазоне рентгеновских длин волн, но и в диапазоне энергий фотонов 50—100 кэВ и выше, где использование других рентгенооптических элементов затруднительно.

1. Pantell R. H., Chung P. S. // IEEE J. of Quant. Electr. 1978. V. QE-14. P. 694.

2. Мишетт А. Оптика мягкого рентгеновского излучения. М., 1989.

3. Физика визуализации изображений в медицине / Под ред. С. Уэбба. М., 1991. Т. 1.

4. Спектры излучения рентгеновских установок: Справ. М., 1990.

5. Зеркальная рентгеновская оптика / Под ред. А. В. Виноградова. Л., 1989.

6. Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф., Константинов Я. А. // Письма в ЖТФ. 1991. Т. 17. Вып. 6. С. 45.

7. Dudchik Yu. I., Komarov F. F., Konstantinov Ya. A. // Nucl. Instr. Meth. A. 1992. V. 320. P. 22.

8. Dudchik Yu. I., Komarov F. F., Lobotsky D. G., et al // Nucl. Instr. Meth. B. 1992. V. 71. P. 92.

Поступила в редакцию 17.12.93.

ФЛУОРЕСЦЕНЦИЯ АНТРАЦЕНА В МАТРИЦАХ ШПОЛЬСКОГО ПРИ СЕЛЕКТИВНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

Fluorescence spectra of anthracene in heptane at 77 K have been analyzed for various excitation frequencies. It has been found that a specific character of the molecular distribution function in frequencies of 0-0 transition is caused by the existence of two subensembles of anthracene molecules which are associated with ordered and disordered types of the activator implantation. From the similar widths of homogeneous profiles of both the implantation types it has been inferred that electron-phonon interactions of an activator with a matrix in ordered and disordered phases are similar in nature.

Несмотря на то, что изучению спектров полициклических молекул в матрицах Шпольского посвящено значительное число работ (см. [1, 2]), ряд вопросов требует дополнительных исследований. В первую очередь это касается соотношения однородного и неоднородного уширения и, в частности, характера функции неоднородного уширения в матрицах Шпольского. В большинстве работ молекулы в матрицах Шпольского исследуются при неселективном (широкополосном) возбуждении. Однако важная информация о характере уширения может быть получена при селективном возбуждении. В настоящей работе приводятся результаты исследований спектров антрацена в гептане при возбуждении узкополосным ($\Delta\nu = 2 \text{ см}^{-1}$) перестраиваемым лазером при 77 К.

Матрицы Шпольского получались путем замораживания тонкого слоя раствора на поверхности охлаждаемого жидким азотом хладопровода, помещенного в вакуумный оптический криостат специальной конструкции. Температура образца не превышала температуру жидкого азота более чем на 2 К. Люминесценция возбуждалась излучением перестраиваемого по частоте пикосекундного лазерного источника, описанного в [3]. Система регистрации, работающая в режиме счета фотонов, включала: монохроматор ДФС-12, многоканальный временной анализатор в качестве промежуточного накопителя, устройство управления, позволяющее осуществлять многократное сканирование спектра для накопления информации, блок сопряжения с ПЭВМ.

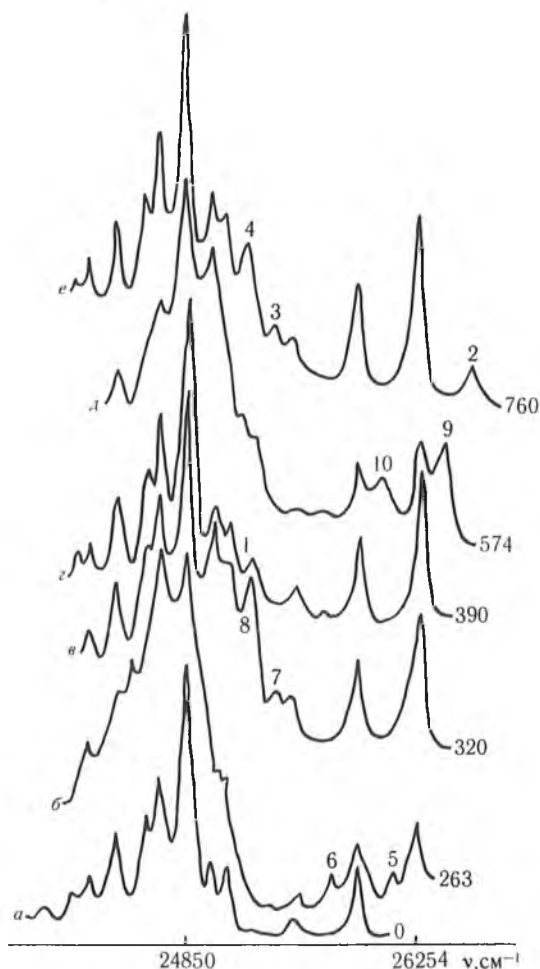
Спектры флуоресценции антрацена в гептане при 77 К для различных частот возбуждения приведены на рисунке, где цифры у кривых указывают на разность между частотой возбуждения и частотой 0—0-перехода антрацена в матрице гептана [4] ($\nu_{0-0} = 26254 \text{ см}^{-1}$). Отметим следующие особенности спектров флуоресценции.

1. При изменении частоты возбуждения в диапазоне $\nu_{0-0} \pm 100 \text{ см}^{-1}$ существенных изменений в спектрах ни по форме, ни по положению полос не наблюдается. Таким образом, можно сказать, что ширина полос в спектрах флуоресценции ($\sim 40 \text{ см}^{-1}$) определяется однородной шириной контура.

2. При возбуждении в области полос поглощения, соответствующих колебанию 390 см^{-1} и его первому обертону (см. рисунок, *з, е*), в спектрах появляются линии 1—4, которые формально могли бы быть интерпретированы как горячие. Так, полоса 1, смещенная примерно на 400 см^{-1} в область более высоких частот по отношению к интенсивной полосе 1403 см^{-1} , может соответствовать переходу с уровня 390 см^{-1} возбужденного состояния на уровень 1403 см^{-1} основного состояния. Аналогично антистоксова полоса 2 может соответствовать переходу с 780 см^{-1} возбужденного состояния на 390 см^{-1} основного состояния. Подобным же образом к горячим линиям формально могут быть отнесены полосы 3 и 4. Однако, как будет видно из дальнейшего, подобное объяснение не соответствует действительности.

3. Спектры *б, в* получены при возбуждении длиной волны, лежащей в промежутке между частотами 0—0-перехода и $\nu_{0-0} + 390 \text{ см}^{-1}$ (первого нормального колебания). Полосы 5 и 6 спектра *б* смещены относительно полосы возбуждения на 400 и 790 см^{-1} соответственно. Такой вид спектра указывает на то, что данные полосы принадлежат спектру флуоресценции центров, частота 0—0-перехода которых не совпадает с частотой 0—0-перехода спектров Шпольского, т. е. они принадлежат селективно

возбуждаемым узкополосным излучением центрам из подансамбля, имеющего широкую функцию распределения по частотам чисто электронного перехода. В отличие от центров, ответственных за формирование спектров Шпольского, обсуждаемый подансамбль образован молекулами, находящимися в неупорядоченной фазе матрицы. Таким образом, полосы 5 и 6 в спектре *б* соответствуют переходам с $\nu' = 0$ возбужденного состояния на уровни $\nu'' = 400 \text{ см}^{-1}$ и $\nu'' = 2 \cdot 400 \text{ см}^{-1}$ основного. Предлагаемая интерпретация полностью подтверждается анализом спектров *в*, *д*. Так, полосы 7 и 8 в спектре *в*, отстоящие на 1260 см^{-1} и 1400 см^{-1} от частоты возбуждения, объясняются как соответствующие переходам с $\nu' = 0$ на $\nu'' = 1265 \text{ см}^{-1}$ и $\nu'' = 1410 \text{ см}^{-1}$, а полосы 9 и 10 в спектре *д* — переходам $0-0$ и $\nu' = 0 \rightarrow \nu'' = 400 \text{ см}^{-1}$.



Спектры флуоресценции антрацена в гептане
($T = 77 \text{ К}$, $C = 10^{-5} \text{ М/л}$) при частотах возбуждения:
а — 26254; *б* — 26517; *в* — 26583; *г* — 26633; *д* — 26828;
е — 27015 см^{-1}

Общая картина формирования спектров испускания в такой системе (функция распределения молекул по частотам $0-0$ -перехода включает узкий пик и широкий пьедестал) выглядит следующим образом. При возбуждении частотами, близкими к $0-0$ -переходу «центров Шпольского», возбуждаются в основном эти центры, спектр флуоресценции не зависит от частоты возбуждения. Это положение сохраняется и при некоторых отстройках (в пределах одной-двух полуширин однородного контура), так как за счет достаточно высоких крыльев однородного уширенной полосы поглощение в крыльях доминирует над поглощением широкого неоднородно уширенного пьедестала, отвечающего неупорядо-

ченной фазе. Кроме того, при малых отстройках селективно возбуждаемые спектры флуоресценции центров неупорядоченной фазы близки по частоте к спектрам Шпольского (их положение отличается на величину отстройки). Поскольку их доля в общей флуоресценции невелика, они скрываются под крыльями полос спектра Шпольского. При больших отстройках относительный вклад спектров Шпольского, возбуждаемых в далеких крыльях линий, падает.

Селективно возбуждаемые из неупорядоченной фазы спектры флуоресценции, сдвинутые на величину отстройки относительно спектров Шпольского, становятся сопоставимы с последними по интенсивности, что и приводит к усложнению наблюдаемой картины (см. б, в, д). При возбуждении же на частотах, соответствующих переходам на более высокие колебательные подуровни для подансамбля, отвечающего упорядоченной фазе, одновременно возбуждаются центры, принадлежащие неупорядоченной фазе, но возбуждение осуществляется в 0—0-полосу (см. рисунок, з) и вибранный уровень, соответствующий $\nu = 390 \text{ см}^{-1}$ (е). В результате на обычный спектр Шпольского накладываются спектры флуоресценции неупорядоченной фазы, сдвинутые на 400 см^{-1} (з, е). Некоторые из полос переходов в этих спектрах совпадают по частотам с линиями спектров Шпольского, другие же (например, полоса 2 спектра е, соответствующая 0—0-переходу для неупорядоченной фазы, а также полосы 4,3, соответствующие переходам с $\nu' = 0$ на $\nu'' = 1410 \text{ см}^{-1}$, $\nu'' = 1265 \text{ см}^{-1}$) свободны от наложения и создают в итоге иллюзию появления горячих полос.

Контур функции неоднородного уширения для молекул неупорядоченной фазы обладает интересной особенностью. Попытка получить спектры флуоресценции при селективном возбуждении в области частот более низких, чем частота 0—0-перехода для спектров Шпольского, не увенчалась успехом: при увеличении отстройки форма спектра не меняется, происходит лишь монотонное падение интенсивности. Такое поведение однозначно указывает на асимметричное расположение контура функции неоднородного уширения относительно пика, соответствующего упорядоченной фазе; этот контур практически полностью находится в области более высоких частот.

Иными словами, упорядоченный подансамбль характеризуется наибольшими частотами электронного перехода. Практически все центры, соответствующие неупорядоченной фазе, имеют большие частоты перехода, т. е. более низкие энергии взаимодействия с матрицей. Заслуживает особого внимания также то обстоятельство, что ширина полос, соответствующих селективно возбуждаемым спектрам испускания неупорядоченной фазы, близка к их ширине в обычных спектрах Шпольского. Отметим в этой связи, что наблюдение тонкоструктурных спектров при температурах выше гелиевых оказывается возможным только в редких случаях [5].

Полученные результаты показывают, что возможность наблюдения тонкоструктурных спектров в матрицах Шпольского при азотных температурах, свидетельствующая об относительно низком электрон-фононном взаимодействии в этих системах, обусловлена скорее не спецификой упорядоченного характера внедрения примеси в кристаллическую структуру матрицы, а некоторыми общими свойствами системы матрица—активатор: тонкоструктурность имеет место не только для спектров упорядоченной фазы (Шпольского), но и для центров, входящих в неупорядоченную фазу.

Работа финансировалась Фондом фундаментальных исследований Республики Беларусь (проект Ф 36-219).

1. Нурмухаметов Р. Н. // Успехи химии. 1969. Т. 38. Вып. 2. С. 351.
2. Shpol'skii E. V., Bolotnikova T. N. // Pure Appl. Chem. 1974. V. 37. № 1-2. Р. 183.
3. Сачеников К. А., Гулис И. М. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1989. № 1. С. 6.
4. Болотникова Т. Н., Климова Л. А., Нерсесова Г. Н., Уткина Л. Ф. // Оптика и спектроскопия. 1966. Т. 21. Вып. 4. С. 420.
5. Гуринович Г. П., Старухин А. С., Некрасов В. В. и др. // Докл. АН СССР. 1989. Т. 304. № 6. С. 1350.

Поступила в редакцию 22.10.93.

СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РАБОТЫ ДВУХКАНАЛЬНОГО ПОЛЯРИМЕТРА

The effect of multiplicative PEM noise on the error in determination of the luminescence polarization extent upon pulse excitation has been studied. It has been shown that energy fluctuations of an exciting light pulse exert no influence on the error in determination of the luminescence polarization extent. An algorithm has been proposed for processing of the results obtained in a set of experiments.

Измерение степени поляризации импульсного излучения, как правило, проводится по двухлучевой методике [1]. Рассмотрим традиционную схему двухканального измерения степени поляризации люминесценции при импульсном возбуждении (рисунок).

Исследуемый образец 1 облучается световым импульсом с интенсивностью I_0 . Вторичное излучение образца разделяется на два потока, поляризованных во взаимно перпендикулярных плоскостях. Будем полагать, что интенсивности этих потоков I_1 , I_2 пропорциональны интенсивности возбуждающего импульса:

$$\begin{aligned} I_1 &= \alpha_1 I_0, \\ I_2 &= \alpha_2 I_0, \end{aligned} \quad (1)$$

где α_1 , α_2 — безразмерные коэффициенты, зависящие от свойств исследуемого образца. (Случай нелинейной зависимости I_1 , I_2 от I_0 будет рассмотрен позднее.)

Интенсивности обоих потоков измеряются с помощью двух независимых трактов 2, 3, эффективности которых обозначим κ_1 и κ_2 . Отметим, что эти параметры определяются чувствительностью фотоприемников, оптическим пропусканием каналов, устройством поляризационного делителя и т. д., но не зависят от свойств исследуемого образца. Таким образом, величины регистрируемых сигналов в обоих каналах z_1 , z_2 могут быть представлены в виде:

$$\begin{aligned} z_1 &= \kappa_1 I_1 = \kappa_1 \alpha_1 I_0, \\ z_2 &= \kappa_2 I_2 = \kappa_2 \alpha_2 I_0. \end{aligned} \quad (2)$$

В качестве источников флуктуаций сигналов z_1 , z_2 могут выступать флуктуации интенсивности возбуждающего импульса I_0 и флуктуации эффективности каналов κ_1 , κ_2 . Установки, работающие по данной схеме, предназначены для измерения степени поляризации, которая может быть выражена через поляризационное соотношение

$$\gamma = I_1/I_2 = \alpha_1/\alpha_2. \quad (3)$$

В линейном режиме возбуждения люминесценции поляризационное отношение не зависит от интенсивности возбуждения I_0 , поэтому можно ожидать, что функция распределения отношения сигналов

$$\eta = z_1/z_2 \quad (4)$$

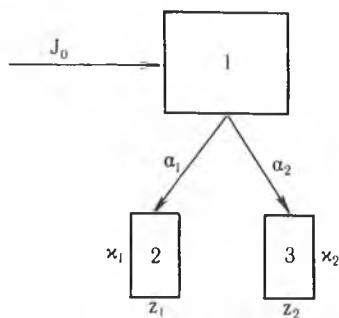
не будет зависеть от величины I_0 и, следовательно, от ее флуктуаций.

Для последующих расчетов необходимо конкретизировать статистические свойства случайных параметров κ_1 и κ_2 . Будем считать, что шумы измерительных каналов являются мультипликативными [2], и положим, что

$$\kappa_{1,2} = \bar{\kappa}_{1,2}(1 + \varepsilon_{1,2}), \quad (5)$$

где $\bar{\kappa}_{1,2}$ — среднее значение эффективности каналов; $\varepsilon_{1,2}$ — их относительные флуктуации.

Так как чувствительности каналов зависят от множества случайных факторов, то можно предположить, что случайные величины ε_1 , ε_2 подчиняются нормальному распределению со средним 0 и неизвестной дис-



персией ε^2 . Тогда, согласно (5) и (2), величины сигналов z_1, z_2 при постоянном значении I_0 также являются нормальными случайными величинами с математическими ожиданиями $I_0\alpha_1\bar{\kappa}_1, I_0\alpha_2\bar{\kappa}_2$ и их дисперсиями $I_0\alpha_1^2\bar{\kappa}_1^2\varepsilon^2, I_0\alpha_2^2\bar{\kappa}_2^2\varepsilon^2$ соответственно. Таким образом, при постоянном значении I_0 , z_1 и z_2 являются независимыми, поэтому легко можно найти функцию распределения отношения этих сигналов (методика таких преобразований хорошо известна [3]).

Расчет этой функции приводит к результату:

$$\varphi(\eta) = 1/\sqrt{2\pi} \cdot 1/\beta (\eta/\beta + 1)((\eta/\beta)^2 + 1)^{-3/2} \times \\ \times \exp(-(\eta/\beta - 1)^2/2\varepsilon^2((\eta/\beta)^2 + 1)), \quad (6)$$

где $\beta = \alpha_1\bar{\kappa}_1/\alpha_2\bar{\kappa}_2$.

Отметим, что при $\bar{\kappa}_1 = \bar{\kappa}_2$ введенный параметр β совпадает с поляризационным отношением γ .

Как и следовало ожидать, функция (6) не зависит от I_0 . Непосредственное использование полученной формулы затруднительно вследствие ее громоздкости. Однако из (6) следует, что величина

$$U = \eta/\beta - 1/\varepsilon \sqrt{(\eta/\beta)^2 + 1} \quad (7)$$

подчиняется стандартизованному нормальному распределению. Это обстоятельство позволяет построить доверительный интервал для отношения β , исходя из условия: с доверительной вероятностью P величина U удовлетворяет неравенству

$$|U| \leq |U_p|, \quad (8)$$

где U_p — процентные точки нормального распределения.

Методом последовательных приближений, пренебрегая членами более высокого порядка малости, чем первый, получим:

$$\eta - U_p\varepsilon\sqrt{2} \leq \hat{\beta} \leq \eta + U_p\varepsilon\sqrt{2}$$

или в стандартной записи

$$\hat{\beta} = \eta \pm U_p\varepsilon\sqrt{2}. \quad (9)$$

Заметим, что точечная оценка $\beta = \eta; \left(\frac{\alpha_1\bar{\kappa}_1}{\alpha_2\bar{\kappa}_2} = \frac{z_1}{z_2}\right)$ очевидна.

Как следует из (9), непосредственному измерению поддается только отношение $\beta = \frac{\alpha_1\bar{\kappa}_1}{\alpha_2\bar{\kappa}_2}$, которое зависит как от свойств образца ($\gamma = \alpha_1/\alpha_2$),

так и от измерительных каналов (отношение $\frac{\bar{\kappa}_1}{\bar{\kappa}_2}$). Непосредственный

расчет чувствительностей измерительных каналов κ_1 и κ_2 затруднителен. Поэтому отношение κ_1/κ_2 необходимо измерять экспериментально. Это можно осуществить, направляя в измерительные каналы заведомо неполяризационное излучение. Отношение сигналов (деполяризационное) в этом случае $\eta^{(0)} = z_1^{(0)}/z_2^{(0)}$ приблизительно будет равно $\bar{\kappa}_1/\bar{\kappa}_2$ с погрешностью, определяемой той же зависимостью (9). Тогда степень поляризации рассчитывается по формуле

$$P = \frac{\hat{\beta} - \hat{\beta}^{(0)}}{\hat{\beta} + \hat{\beta}^{(0)}} \quad (10)$$

с погрешностью

$$\Delta P = \sqrt{\left(\frac{\partial P}{\partial \beta} \cdot \Delta \beta\right)^2 + \left(\frac{\partial P}{\partial \beta^{(0)}} \cdot \Delta \beta^{(0)}\right)^2} = \\ = \frac{2}{\beta + \beta^{(0)}} \cdot \sqrt{(\beta^{(0)} \Delta \beta)^2 + (\beta \cdot \Delta \beta^{(0)})^2}. \quad (11)$$

Проводится ряд повторных измерений отношения η , необходимость которых обусловлена тем обстоятельством, что дисперсия эффективности каналов ε^2 , как правило, априори неизвестна.

Рассмотрим, как можно оценить погрешность определения степени поляризации при повторных измерениях.

Мы показали, что величина $\bar{U}$, определяемая соотношением (7), подчиняется стандартному распределению. Если проведено n измерений отношения $\eta_i = z_{1(i)}/z_{2(i)}$, то все U_i независимы, и, следовательно, величина

$$\Theta = \frac{\bar{U}}{\sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{(U_i - \bar{U})^2}{n(n-1)}}}, \quad (12)$$

где $\bar{U} = \sum_{i=1}^n U_i / n$ подчиняется распределению Стьюдента с $(n-1)$ степенью свободы [3]. Тогда с доверительной вероятностью P выполняется неравенство

$$|\Theta| \leq t_{p, n-1}, \quad (13)$$

где $t_{p, n-1}$ — процентные точки распределения Стьюдента.

Неравенство (13) позволяет построить оценку для параметра $\beta = \frac{\alpha_1 \bar{\kappa}_1}{\alpha_2 \bar{\kappa}_2}$. Распределение Стьюдента имеет максимум при $\Theta = 0$. Следовательно, точечная оценка параметра β должна находиться из $\Theta = 0$ или в явной форме:

$$\sum_{i=1}^n U_i = \sum_{i=1}^n \frac{\eta_i / \beta_i - 1}{\sqrt{\left(\frac{\eta_i}{\beta_i}\right)^2 + 1}}. \quad (14)$$

Это уравнение будем решать методом последовательных приближений. Так, в нулевом приближении

$$\hat{\beta} = \sum_{i=1}^n \eta_i / n. \quad (15)$$

Последующие приближения можно находить, используя метод Ньютона [3].

Погрешность оценки параметра β (т. е. доверительный интервал) определяется решением неравенства (13), которая приблизительно равна

$$\Delta\beta = t_{n-1, p} \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (\eta_i - \bar{\eta})^2}{n(n-1)}}. \quad (16)$$

Для проверки полученных соотношений было проведено компьютерное статистическое моделирование процесса измерений в рамках рассмотренной модели. Анализ результатов показал, что соотношения удовлетворительно описывают статистические свойства приведенных оценок. Кроме того, оказалось, что если число повторных измерений меньше 10, то разность между нулевым приближением оценки β (15) и ее последующим приближением, рассчитанным по методу Ньютона, меньше чем погрешность оценки, рассчитанной по формуле (16). Следовательно, в этой ситуации достаточно ограничиться нулевым приближением (15).

Подводя итоги, приведем последовательные стадии измерений и обработки их результатов:

1. Провести ряд повторных измерений отношения сигналов $\eta_i^{(0)} = \frac{z_{1(i)}^{(0)}}{z_{2(i)}^{(0)}}$ при полностью деполяризованном вторичном излучении.
2. Рассчитать оценку параметра $\hat{\beta}^{(0)}$ и ее погрешность $\Delta\beta^{(0)}$ по формулам (15), (16).
3. Провести ряд повторных измерений отношения сигналов $\eta_i = \frac{z_{1(i)}}{z_{2(i)}}$ для исследуемого излучения.
4. Рассчитать по формулам (15), (16) оценку параметра β и его погрешность $\Delta\beta$.
5. Используя соотношения (10), (11), найти оценку степени поляризации и ее погрешность.

В заключение отметим, что если для увеличения точности измерений увеличить число повторных измерений, то имеет смысл уточнить точечные оценки (15), решая более точно уравнение (14) с помощью метода Ньютона.

1. Буров Л. И., Воропай Е. С., Клищенко А. П., Саржевский А. М. // Известия АН СССР. Сер. физ. 1972. Т. 36. № 5. С. 951.
2. Ветохин С. С., Гулаков И. Р., Перцев А. Н., Резников И. В. Одноэлектронные фотоприемники. М., 1979.
3. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М., 1978.

Поступила в редакцию 04.03.94.

УДК 535.372:548

А. П. ЗАЖОГИН, А. И. СЕРАФИМОВИЧ, А. А. ЗАЖОГИН

ДОНОРНАЯ СПОСОБНОСТЬ НЕЙТРАЛЬНЫХ ЛИГАНДОВ И ЕЕ ВЛИЯНИЕ НА СТРУКТУРНЫЕ И СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПАРАМЕТРЫ УРАНИЛНИТРАТОВ

The analytical expressions for the dependences between the donor ability of neutral ligands and spectral, structural parameters of $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{S}$ -type uranyl nitrates have been derived. It has been shown that the distances between uranium and oxygens of nitrate groups increase, whereas the distances between uranium and oxygens of neutral ligands decrease with increasing donor ability of neutral ligands.

Многообразие структур соединений уранила указывает на зависимость характеристик химических связей $\text{U}-\text{O}$ в группе UO_2^{2+} от природы взаимодействующих с ней лигандов и координационного окружения. Высокий заряд центрального иона обеспечивает достаточно прочные связи с ионными и дипольными лигандами, а геометрия их координации задается стерическими факторами и электрическим полем симметрии D_{4h} . Отсутствие достаточно надежного теоретического расчета электронной структуры уранила стимулировало развитие феноменологических методов оценок кратностей его связей с ближайшим окружением.

Одним из наиболее удобных объектов для изучения взаимодействия между группой UO_2^{2+} и лигандами в ураниловых комплексах традиционно считаются нитраты уранила [1], поскольку эти соединения обеспечивают возможность широкой вариации нейтральных лигандов в экваториальном окружении иона уранила, а это, в свою очередь, позволяет полнее и всестороннее изучить пути и характер образования ураниловых комплексов, формирования их структуры, физико-химических, и в частности спектрально-люминесцентных, свойств в зависимости от физико-химических и эмпирических параметров нейтральных лигандов. Однако, несмотря на большое число публикаций, посвященных экспериментальному исследованию нитратных комплексов уранила, вопрос о строении последних остается пока еще не решенным окончательно. Крайне недостаточны систематизированные сведения, в которых отражались бы закономерности последовательного изменения состава, структуры и спектральных свойств соединений уранилнитрата от характеристик нейтральных лигандов.

Частоты ν_{00} в спектрах люминесценции, донорные числа и структурные параметры комплексов уранилнитратов с нейтральными лигандами

Лиганд	ν_{00} , см ⁻¹	R(U—O(S)), Å		R(U—O(NO ₃)), Å		DN
		эксперимент	расчет	эксперимент	расчет	
H ₂ O	20775	2,446	2,445	2,484	2,484	18
TfФ	20725	2,42	2,421	2,495	2,4948	20,3
ДМФА	20573	2,357	2,357	2,524	2,524	26,6
Мочевина	—	2,345	2,343	2,53	2,53	—
ДМСО	20495	—	2,324	—	2,5389	29,8

Перечисленные вопросы рассматриваются в настоящей работе на основе анализа низкотемпературных ($T = 77\text{K}$) спектров люминесценции и нейтроно- и рентгенографических структурных данных ряда уранил-нитратов с различными нейтральными лигандами. Для количественной характеристики донорной способности нейтральных лигандов использованы значения донорных чисел DN по Гутману [2,3] как наиболее полно отражающие специфические и неспецифические взаимодействия между донорами и акцепторами электронов.

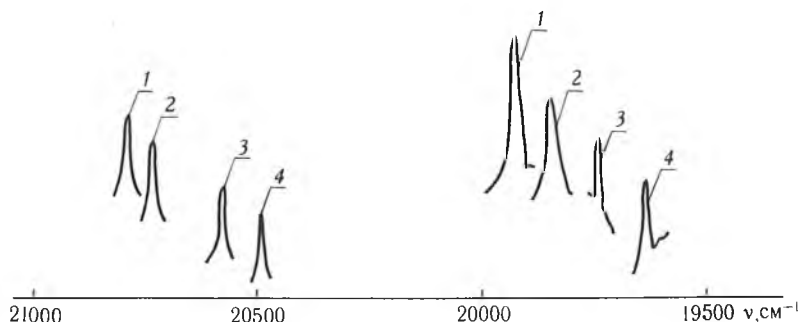


Рис. 1. Начальные участки спектров люминесценции комплексов уранил-нитрата с:
1 — H_2O ; 2 — ТГФ; 3 — ДМФА; 4 — ДМСО

Начальные участки спектров люминесценции ряда образцов уранил-нитратов типа $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{S}$, где S — нейтральный лиганд (H_2O , ТГФ, ДМФА, ДМСО), приведены на рис. 1, в таблице даны частоты чисто электронных переходов ν_{oo} иона уранила, а также значения донорных чисел нейтральных лигандов и некоторые структурные параметры уранилнитратов, исследованных в работах [4—7] методами нейтроно- и рентгенографии. Из анализа спектров видно, что образование донорно-акцепторных комплексов уранилнитрата с нейтральными лигандами приводит к изменению в положении полос в спектрах (с увеличением значения

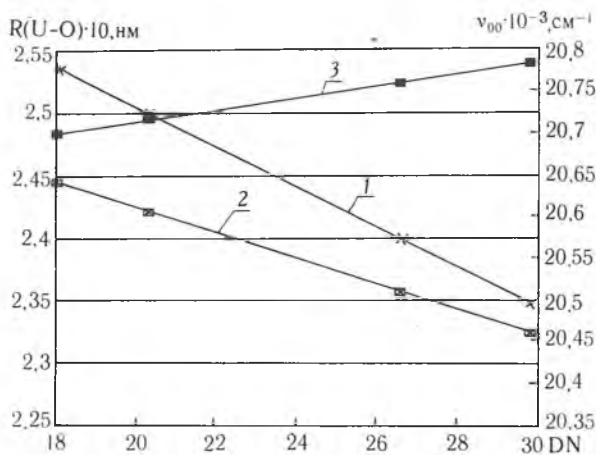


Рис. 2. Зависимость частоты ν_{oo} (1), расстояния уран—кислород нейтрального лиганда (2) и расстояния уран—кислороды нитратных групп (3) от значения донорного числа DN нейтрального лиганда

DN полосы сдвигаются в длинноволновую сторону). Сопоставление приведенных в таблице результатов свидетельствует о том, что изменения частоты ν_{oo} хорошо коррелирует со значением донорных чисел нейтральных лигандов. Зависимость частоты ν_{oo} от донорного числа

лиганда изображена на рис. 2 (1). Уравнение прямой, найденное методом наименьших квадратов, имеет вид:

$$\nu_{\infty}(\text{DN}_S) = \nu_{\infty}(\text{DN}_S = 0) - k\text{DN} = (21198 - 23,5 \text{ DN}) \text{ см}^{-1}, \quad (1)$$

где $\nu_{\infty}(\text{DN}_S = 0)$ — частота чисто электронного перехода иона уранила в комплексе уранилнитрата с двумя нейтральными лигандами (рис. 3) при значении донорного числа последних, равном нулю. Коэффициент корреляции r уравнения равен $-0,997$.

Так как в видимой области спектра ураниловые соединения характеризуются несколькими электронными переходами преимущественно в самом ионе уранила, то полученный результат можно объяснить следующим образом. Как показывают исследования, состояние связей уран — кислород внутри уранильной группировки нельзя считать неизменным: упрочнение связей уран — лиганд во многих случаях сопровождается ослаблением связей уран — кислород уранильной группы. Попытки объяснить эти особенности уранильных комплексов предпринимались неоднократно. Так, М. Е. Дяткина и др. [8] предполагает образование дополнительных (помимо двойных) донорно-акцепторных связей уран — кислород ($\text{O}^+ = \text{U} \leftarrow \text{O}$) за счет неподеленных электронных пар атомов кислорода уранильных групп и пустых орбит атома урана.

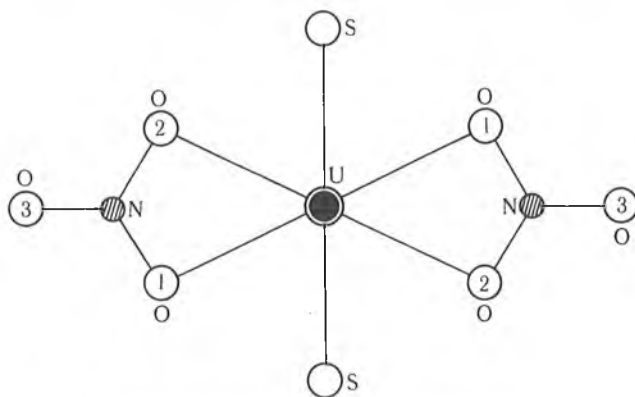


Рис. 3. Строение комплексов уранилнитрата типа $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{S}$

Эти дополнительные донорно-акцепторные связи и связи атома урана с лигандами в экваториальной плоскости конкурируют в том смысле, что чем выше электронодонорные свойства лигандов по отношению к атомам урана уранильных групп, тем менее эффективно участие неподеленных электронных пар атомов кислорода в образовании дополнительных донорно-акцепторных связей в самой уранильной группе. Согласно гипотезе Мак-Глинна и Смита [9], электроны лигандов смещаются на пустые несвязывающие орбиты уранила, что и приводит к разрыхлению связей уран — кислород уранильной группировки. Обе гипотезы таким образом предполагают, что состояние связей уран — кислород уранильной группы изменяется в зависимости от электронодонорных свойств лигандов, хотя до сих пор не существует полной ясности в вопросе, какими же параметрами лигандов и комплекса в целом определяются частоты и интенсивности электронных переходов.

Поскольку между значениями донорной способности нейтральных лигандов и частотой ν_{∞} имеется линейная зависимость, то, учитывая сказанное, можно предположить наличие определенной корреляции и между DN и расстоянием уран — кислород нейтрального лиганда. Сопоставление приведенных в таблице данных подтверждает это предположение: чем больше теплота образования комплекса ($\text{DN} - \Delta\text{H}$), тем прочнее межмолекулярная связь и соответственно меньше это расстояние. Зависимость расстояния $R(\text{U}-\text{O}(\text{S}))$ от DN показана на рис. 2(2). Эта зависимость имеет линейный характер. Интересно, что и между DN и расстоянием $R(\text{U}-\text{O}(\text{NO}_3))$ также имеется корреляционная зависи-

мость, имеющая линейный характер (см. рис. 2.(3)), но с наклоном прямой в противоположную сторону. Уравнения прямых, найденные методом наименьших квадратов, имеют вид:

$$R(U-O(S)) = (2,63 - 1,0275 \cdot 10^{-2} \cdot DN) \text{ \AA}, \quad (2)$$

$$R(U-O(NO_3)) = (2,4006 + 4,641 \cdot 10^{-3} \cdot DN) \text{ \AA}, \quad (3)$$

где значения 2,63 и 2,4006 соответствуют расстояниям уран — кислород нейтрального лиганда и уран — кислороды нитратных групп при значении донорного числа, равном нулю. Коэффициенты корреляции r соответственно равны 0,99997 и 0,9992. Следовательно, можно говорить о строгой линейной зависимости между значением DN и указанными расстояниями.

В заключение следует отметить, что структурные данные для уранил-нитрата с мочевиной [7], донорное число которой в настоящее время еще не определено, отлично укладываются в эти зависимости (см. таблицу, эксперимент и расчет соответственно).

1. Володько Л. В., Комяк А. И., Умрейко Д. С. Ураниловые соединения. Мн., 1981. Т. 1.
2. Гутман В. Химия координационных соединений в неводных растворах. М., 1971.
3. Райхардт К. Растворители и эффекты среды в органической химии. М., 1991.
4. Dally N. K., Muller M. H., Simonsen S. H. // Inorg. Chem. 1971. V.10. N2. P.323.
5. Reynolds J. // Ibid. 1977. V.16. N12. P.3357.
6. Martin-Gil J., Martin-Gil F. J., Peralas A. // Acta Cryst. 1983. V. 39. P.44.
7. Alcock N. W., Kemp T. J. // Acta Cryst. 1990. V.46. N6. P.981.
8. Дяткина М. Е., Марков В. П., Цапкина И. В., Михайлов Ю. Н. // Журн. неорг. химии. 1961. Т. 6. С. 575.
9. McGlynn S. P., Smith J. K. // Journ. Mol. Spectr. 1961. V. 6. P. 164.

Поступила в редакцию 11.10.93.

УДК 541.573:549.516

Т. Д. СОКОЛОВСКИЙ, С. Н. ШАШКОВ

ПОЛНАЯ ЭНЕРГИЯ И ДИНАМИКА РЕШЕТКИ МОНОСУЛЬФИДА КАЛЬЦИЯ

Calculations of the total energy of a crystal lattice, the phonon spectrum and specific heat of calcium monosulphide are carried out in the approximation of nonpair interactions.

Известно, что существование той или иной решетки кристалла при определенных условиях характеризуется минимумом полной энергии, которая зависит, в частности, от расстояния между ближайшими атомами [1]. Это расстояние может изменяться под влиянием различных внешних воздействий. Выбирая в качестве такого фактора температуру, можно определить энергию элементарных возбуждений, например фононов [2]. В данной статье рассмотрен кристалл CaS и рассчитаны полная энергия, фононный спектр и удельная теплоемкость решетки типа NaCl . Вычислена также полная энергия CaS для структуры типа CsCl . Предполагается, что в обоих случаях химическая связь между атомами смешанная с участием кулоновской, обменной и других компонент полной энергии, которые находятся для каждой решетки отдельно.

Полная энергия решетки CaS . С созданием квантовой механики стали появляться работы по расчетам полной энергии решетки, однако лишь современные компьютеры позволили получать результаты, близкие к экспериментальным [3, 4].

Рассмотрим полную энергию сцепления ионов кристалла CaS с учетом вклада шести координационных сфер в энергию парных U_p и непарных U_N взаимодействий:

$$U = U_p + U_N = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n U_a(R_i) + U_M + \sum_{i=1}^N f(\rho_i)^* \quad (1)$$

* Здесь и далее все величины приводятся в атомных единицах.

Парная часть энергии представляет собой сумму кулоновской U_c , кинетической U_k , обменной U_e и корреляционной U_{cor} компонент. Кулоновская энергия вычисляется [5] согласно формуле:

$$U_c = \frac{z_a z_b}{R} + \int \int \frac{\rho_a(r_1) \rho_b(r_2)}{r_{12}} dv_1 dv_2 - z_b \int \frac{\rho_a(r_1)}{r_{1b}} dv_1 - z_a \int \frac{\rho_b(r_2)}{r_{2a}} dv_2, \quad (2)$$

где Z_a , Z_b — заряды ядер атомов a , b ; R — расстояние между ядрами атомов; r_{1b} — расстояние между ядром атома b и электроном 1; r_{12} — расстояние между электронами 1 и 2; $\rho_a(r_1)$, $\rho_b(r_2)$ — электронные плотности атомов a , b в точках r_1 и r_2 , рассчитанные по методу Хартри — Фока [6].

Вклады кинетической, обменной и корреляционной частей в энергию сцепления пар атомов Ca , S определены в приближении электронного газа и представлены на рис. 1 кривыми 2—4; суммарное значение энергии U_a пары атомов кальция и серы в зависимости от расстояния между ними — кривой 5.

Перечисленные составляющие парной энергии являются короткодействующими, как и непарная энергия, которая определяется по формуле (1) в приближении сильной связи [4] с помощью соотношения

$$f(\rho_i) = (\sum_j \rho_{ij})^{1/2}. \quad (3)$$

Парная энергия U_p решетки, кроме упомянутых, включает также энергию Маделунга:

$$U_m = z_{Ca} z_S \alpha / R, \quad (4)$$

где α — константа Маделунга, равная в данном случае 1,747558, так как кристалл CaS стабилен при решетке типа $NaCl$. Эффективные заряды ионов $Z_{Ca} = 1,23$ lel; $Z_S = -1,23$ lel.

На рис. 2 приведены результаты расчетов парной и непарной энергий, а также полной энергии кристалла CaS в зависимости от постоянной решетки. Видно, что минимальное значение полной энергии, равное $-1,28$ Мдж/моль, соответствует постоянной решетки $a = 0,567$ нм, которая по рентгеновским измерениям равна $0,568$ нм. Проведен также

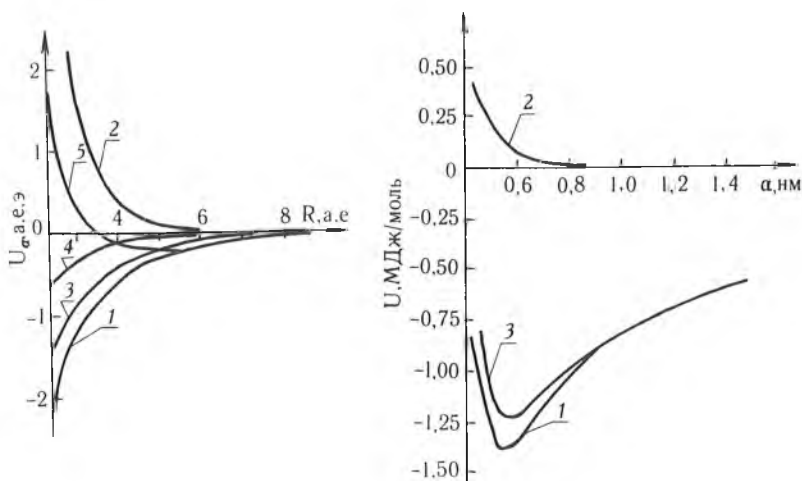


Рис. 1. Парная энергия атомов кальция и серы:

1 — кулоновская; 2 — кинетическая; 3 — обменная; 4 — корреляционная энергия; 5 — полная энергия взаимодействия атомов кальция и серы

Рис. 2. Полная энергия решетки моносulfида кальция (3); парная часть полной энергии (1); непарная часть полной энергии (2)

расчет полной энергии CaS в предположении, что его решеткой является решетка типа $CsCl$. Оказалось, что эта структура для CaS метастабильна, так как минимальное значение $U = -1,11$ Мдж/моль, что соответствует постоянной решетки $a = 0,378$ нм.

Фононный спектр и теплоемкость CaS. В данной статье применена модель кристалла CaS со структурой NaCl. В гармоническом приближении теории Борна учтены взаимодействия атомов с тремя ближайшими координационными сферами, а также кулоновское дальное действие. Вследствие высокой симметрии кристалла число параметров связи атомов сравнительно невелико. Так, для описания взаимодействия атома с ближайшими его соседями необходимо ввести два параметра для первой координационной сферы, три — для второй и два — для третьей. Однако общее число параметров связи оказывается не семь, а десять, так как следует иметь в виду, что различные атомы взаимодействуют со своим окружением по-разному. Численные значения параметров связи определены из потенциальной части энергии U_a на основе представлений Делоне [7] путем выделения центральной и угловой частей сил связи и даются в $10^2 \cdot \text{Н/м}$: $\alpha_1 = 1,331$; $\beta_1 = 2,961$; $\alpha_2 = 0,258$; $\beta_2 = 3,081$; $\gamma_2 = 2,823$; $\alpha'_2 = 0,310$; $\beta'_2 = 0,883$; $\gamma'_2 = 0,683$; $\alpha_3 = 0,240$; $\beta_3 = 0,082$.

Как известно, решение системы линейных дифференциальных уравнений, описывающих малые колебания кристаллической решетки, приводит к рассмотрению динамической матрицы [1], которую в данном случае можно записать:

$$D(q) = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{12} & d_{22} & d_{23} & d_{15} & d_{25} & d_{26} \\ d_{13} & d_{23} & d_{33} & d_{16} & d_{26} & d_{36} \\ d_{14} & d_{15} & d_{16} & d_{44} & d_{45} & d_{46} \\ d_{15} & d_{25} & d_{26} & d_{45} & d_{55} & d_{56} \\ d_{16} & d_{26} & d_{36} & d_{46} & d_{56} & d_{66} \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Элементы этой матрицы зависят от волнового вектора q , параметров связи и масс атомов, но для простоты записи они опущены. В данном случае матрица действительная и симметрическая, так как каждый атом решетки является центром симметрии. Необходимым и достаточным условием существования ненулевого решения однородной системы уравнений является обращение в нуль детерминанта:

$$|D(q) - 4\pi\nu^2 E| = 0, \quad (6)$$

где E — единичная матрица порядка (6×6) .

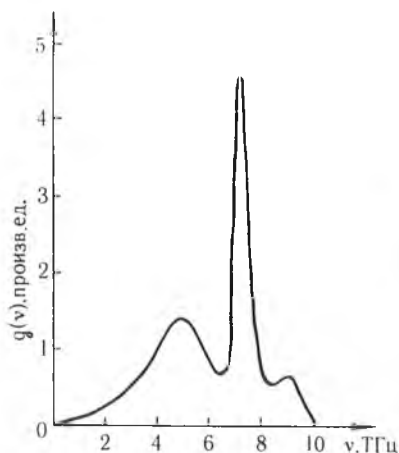


Рис. 3. Фононный спектр решетки моносulfида кальция

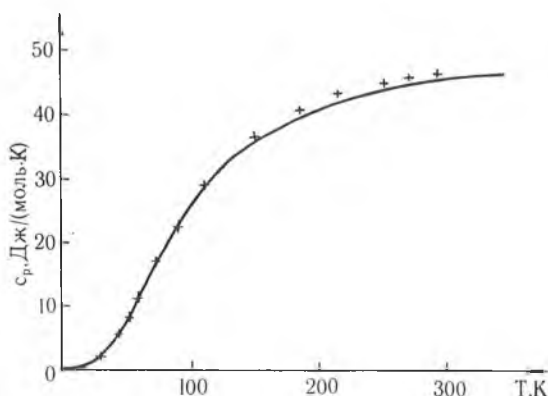


Рис. 4. Температурная зависимость удельной теплоемкости решетки моносulfида кальция

Вычисляя частоты $\nu_j(q)$ согласно (5) и (6) в 124848 точках зоны Бриллюэна и учитывая их вклад на конечном интервале частот, получаем $g(v)$, фононный спектр CaS (рис. 3). По оси абсцисс указана частота нормальных колебаний решетки CaS в терагерцах, а по оси ординат — плотность состояний фононов в произвольных единицах, удовлетво-

ряющих условию нормировки фононного спектра к единице. Очевидно, что существуют две характерные области частот: акустических и оптических с плавным переходом к нулю.

Полученная функция $g(\nu)$ распределения частот нормальных колебаний использована для расчета температурной зависимости удельной теплоемкости решетки CaS при постоянном объеме в виде:

$$c_V(T) = 6Nk \int_0^{\sigma_{\max}} \frac{(h\nu/kT)^2 \exp(-h\nu/kT)}{[1 - \exp(-h\nu/kT)]^2} g(\nu) d\nu. \quad (7)$$

В полученные значения функции $c_V(T)$ вносится поправка [8] с целью перехода к удельной теплоемкости при постоянном давлении:

$$\Delta C = c_p - c_V = ANk^2 T. \quad (8)$$

На рис. 4 сплошной линией представлен результат расчета температурной зависимости удельной теплоемкости при постоянном давлении c_p , а экспериментальные [9] данные — крестиками.

Согласие полученных результатов на всем указанном интервале температур может свидетельствовать о том, что выбранная модель удовлетворительно описывает тепловое движение атомов в моносulfиде кальция.

1. Б о р н М., Х у а н г К. Динамическая теория кристаллических решеток: Пер. с англ. М., 1958.

2. Р е й с л е н д Дж. Физика фононов: Пер. с англ. М., 1975.

3. Y i n M. T., C o h e n M. L. // Phys. Rev. Lett. 1980. V.45. № 12. P.1004.

4. M a e d a K., V i t e k V., S u t t o n A. P. // Acta Metallurgica. 1982. V.30. № 11. P.2001.

5. K i m Y. S., G o r d o n R. G. // Journ. Chem. Phys. 1974. V.60. № 5. P.1842.

6. Методы расчета электронной структуры атомов и молекул / Под ред. М. Г. Веселова. Л., 1976. С. 5.

7. D e L a u n a y J. // Solid State Physics. 1956. V.2. P.219.

8. L e i b f r i e d G. Gittertheorie der mechanischen und thermischen Eigenschaften der Kristalle. Berlin, 1955. P.239.

9. A n d e r s o n C. T. // Journ. Amer. Chem. Soc. 1931. V.53. № 2. P.476.

Поступила в редакцию 13.12.93.

УДК 535.322

Б. Б. ВИЛЕНЧИЦ, Н. Е. ГАЛИЧ, Д. С. УМРЕЙКО

АНАЛОГИЯ МЕЖДУ РАСХОДИМОСТЬЮ СВЕТОВОГО ПУЧКА В ТУРБУЛЕНТНОЙ СРЕДЕ И САМОДЕФОКУСИРОВКОЙ В СПУТНОМ ПОТОКЕ ГАЗА

The work demonstrates an example of the analogy between the nonlinear and stochastic radiation refraction.

На ограниченных участках лучевой трассы дефокусировка светового пучка малой интенсивности описывается в приближении диффузионного случайного процесса блуждания лучей [1,2]. При этом ширина пучка растет пропорционально кубу пройденного расстояния x^3 . Тепловая самодефокусировка мощного пучка в потоке газа или жидкости, движущихся вдоль луча на ограниченных дистанциях, как будет показано ниже, также приводит к увеличению ширины пучка пропорционально x^3 . Подобие или совпадение характера развития дефокусировки может служить примером аналогии между нелинейной и стохастической рефракцией излучения. Оно указывает на возможность моделирования тепловой самодефокусировки мощного излучения посредством дефокусировки светового пучка малой мощности или на возможность лабораторного моделирования расходимости пучка в различных турбулентных средах при тепловой самодефокусировке излучения в небольшой кювете или трубке, через которую прокачивается жидкость или газ. Возможны случаи, когда нелинейная и случайная рефракции аддитивны.

Рассмотрим коллимированный гауссов пучок, когда распределение интенсивности в начальном сечении $x = 0$ имеет вид:

$$I = I_0 \exp(-r^2/\Lambda_0^2),$$

где $\Lambda_1(x)$ — ширина пучка; $\Lambda_0 = \Lambda_1(x=0)$; x — продольная, r — поперечная координаты соответственно.

Диэлектрическая проницаемость среды $\epsilon = \epsilon_0 + \delta\epsilon$, $\epsilon = \text{const}$, $|\delta\epsilon| \ll \epsilon_0$. Величина $\delta\epsilon$ определяется либо слабым нагревом среды за счет поглощения части энергии излучения, либо статистическими свойствами турбулентности. Как в первом, так и во втором случае параболическое уравнение для огибающей электрического поля имеет вид:

$$2ik_0 \partial_x E + \frac{1}{r} \partial_r (r \partial_r E) + \frac{k_0^2}{\epsilon_0} \delta\epsilon E = 0, \quad (1)$$

где k_0 — волновой вектор; $I = c\sqrt{\epsilon_0} |E|^2/8\pi$; c — скорость света.

В турбулентной среде в сечении $x = L$ квадрат ширины пучка можно записать в виде:

$$\langle \Lambda_1^2 \rangle = \Lambda_0^2 + \frac{4}{3} D x^3. \quad (2)$$

Здесь $\langle \dots \rangle$ означает статистическое усреднение по ансамблю различных реализаций случайной среды; D — коэффициент диффузии функции распределения лучей по углам рассеяния, определяемый пространственными корреляциями флуктуаций $\delta\epsilon$. Для гауссовых корреляций с радиусом R величина $D = \sqrt{\pi} \langle \delta\epsilon^2 \rangle / 4\epsilon_0^2$ [1]. При этом средняя по сечению пучка интенсивность $\bar{I}(x) = \bar{I}(x=0) + \Delta\bar{I}(x)$ описывается соотношением

$$\langle (\Delta I)^2 \rangle = \sqrt{\pi} I_0 \langle \delta\epsilon^2 \rangle L^3 / 3\epsilon_0 R^2. \quad (3)$$

Область применимости формул (2) и (3) определяется условиями [1, 2]:

$$L \gg R, \quad R \gg k_0^{-1}, \quad \langle (\Delta I)^2 \rangle \ll I_0^2, \quad L < k_0 R^2.$$

В отсутствии турбулентности, при тепловой саморефракции мощного излучения $\delta\epsilon = \epsilon_T \theta$ (θ — неоднородность температуры среды, обусловленная ее нагревом при поглощении части световой энергии; $\epsilon_T = d\epsilon/dT$; T — температура среды). В потоке газа или жидкости, движущемся вдоль луча со скоростью V , на ограниченных участках трассы длиной $L < \Lambda^2 V / \chi$ (χ — температуропроводность) в стационарном случае θ определяется из уравнения:

$$\rho c_p v \partial_x \theta = \alpha I(x, r),$$

где ρ — плотность, c_p — теплоемкость среды, α — коэффициент поглощения света.

В приближении заданного поля $\theta = \alpha I(x=0)x/\rho c_p V$ и для $\delta\epsilon = \epsilon_T \theta$ из (1) можно получить распределение интенсивности в виде:

$$I = I_0 e^{-\frac{r^2}{\Lambda_0^2}} \left\{ 1 + \frac{x^3 \epsilon_T \alpha I_0}{3\Lambda_0^2 \epsilon_0 \rho c_p V} \left(1 - 2 \frac{r^2}{\Lambda_0^2} \right) e^{-\frac{r^2}{\Lambda_0^2}} \right\}. \quad (4)$$

Искажение гауссова распределения интенсивности в среде с $\epsilon_T < 0$ обусловлено самодефокусировкой. Длина самодефокусировки, как следует из (4), определяется величиной

$$\Lambda_{||} \approx (3\Lambda_0^2 \epsilon_0 \rho c_p V / |\epsilon_T| \alpha I)^{1/3}$$

и формула (4), описывающая приближение геометрической оптики, справедлива только при $x \ll \Lambda_{||}$, $\Lambda_{||} \ll k_0 \Lambda_0^2$ или при мощности излучения P_0 , не превышающей критическую мощность саморефракции

$$P_k \approx 3\pi \epsilon_T \rho c_p V / k_0^3 \Lambda_0^2 \alpha |\epsilon_T|.$$

Мощность пучка сохраняется, т. е. уравнение (1) допускает интеграл

$$P = 2\pi \int_0^\infty I r dr = \text{const} = P_0.$$

Поэтому можно ввести среднюю ширину пучка

$$\Lambda_1^2 = (2\pi/P_0) \int_0^{\infty} I r^3 dr$$

и среднюю по сечению интенсивность

$$\bar{I}(x) = P_0/\pi\Lambda_1^2(x)$$

и переписать условие сохранения мощности в виде:

$$\pi\Lambda_1^2(x)I(x) = P_0.$$

Тогда из (4) следует, что

$$\begin{aligned}\bar{\Lambda}_1^2 &= \Lambda_0^2 - \epsilon_T \alpha I_0 L^3 / 12 \epsilon_0 \rho c_p V, \\ \Delta \bar{I}^2 &= \epsilon_T \alpha I_0^2 L^3 / 12 \epsilon_0 \rho c_p V \Lambda_0^2.\end{aligned}\quad (5)$$

Соотношения (5) справедливы при следующих условиях: скорость движения V должна быть меньше скорости звука V_s и больше скорости светоиндуцированной свободной конвекции $V_k \sim (\alpha g P_0 / \rho c_p)^{1/3}$ (g — ускорение силы тяжести, β — коэффициент теплового расширения) [3], т. е. $V \sim 1+200$ м/с. Кроме того, угол между направлением распространения излучения и направлением движения среды должен быть меньше величины Λ_1/L , где $L \ll \Lambda_{11}$.

Сравнение (2), (3), (5) указывает на их совпадение. Отличие определяется разницей в значениях и природе коэффициентов при L^3 . Диффузию лучей в случайно-неоднородной среде можно моделировать нелинейностью $\epsilon_T \theta$ в движущейся вдоль луча среде, если

$$\sqrt{\pi} \langle \delta \epsilon^2 \rangle / \epsilon_0 R = |\epsilon_T| \alpha I_0 / 4 \rho c_p V.$$

При тепловой самодефокусировке гауссова пучка в случайно-неоднородной среде, движущейся вдоль луча на коротких дистанциях, вклады нелинейности и флуктуаций $\delta \epsilon$ суммируются, если не учитывать флуктуаций нелинейной части $\delta \epsilon$. Действительно, вводя функцию когерентности $\Gamma(x, r_1, r_2) = \langle E(x, r_1) E^*(x, r_2) \rangle$ и следуя [4], для автомодельного распределения Γ вида

$$\Gamma(x, r_1, r_2) = E_0^2 \frac{\Lambda_0^2}{\Lambda_1^2(x)} \exp \left\{ -\frac{r_1^2 + r_2^2}{2\Lambda_1^2} + \varphi(x) (r_1 - r_2)^2 \right\}$$

можно получить соотношение для ширины пучка $\Lambda_1^2(x)$ по средней интенсивности

$$\bar{I} = (c\sqrt{\epsilon_0}/8\pi) \Gamma(x, r_1 = r_2 = r),$$

которое имеет вид:

$$\Lambda_1^2(x) = \Lambda_0^2 + \frac{L^2}{k_0^2 \Lambda_0^2} + \left(4D - \frac{\epsilon_T \alpha I_0}{\epsilon_0 \rho c_p V} \right) \frac{L^3}{3}.$$

Эта формула справедлива при

$$(\Lambda_1(x) - \Lambda_0) \ll \Lambda_0, \quad P_0 < P_k.$$

- Чернов Л. А. Волны в случайно-неоднородных средах. М., 1975.
- Кляцкин В. И., Татарский В. И. Приближение диффузионного случайного процесса в некоторых статистических задачах физики // УФН. 1973. Т. 110. Вып. 4. С. 500.
- Воробьев В. В. Тепловое самовоздействие лазерных пучков на неоднородных атмосферных трассах // Изв. вузов. Сер. Физика. 1977. № 11. С. 61.
- Воробьев В. В. Уширение светового пучка в нелинейной среде со случайными неоднородностями показателя преломления // Изв. вузов. Сер. Радиофизика. 1970. Т. 13. № 7. С. 1053.

Поступила в редакцию 04.03.94.

РАСЧЕТ ФОНОННОГО СПЕКТРА И ТЕПЛОЕМКОСТИ КРЕМНИЯ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

The density functional approach to lattice dynamical calculations is presented. The expression for the phonon frequencies is calculated for silicon using self-consistent pseudo-potential electron energies and wave functions. Results for heat capacity are in good agreement with experiment.

В настоящее время при расчете из первых принципов частот нормальных колебаний (НК) атомов в кристаллической решетке используются два основных метода [1]: «вмороженных» фононов (ВФ) и основанный на применении электронной микроскопической восприимчивости. В случае их применения при вычислении одноэлектронных волновых функций, как правило, реализуется приближение функционала локальной плотности (ФЛП) [2], использующее в своей основе так называемые сохраняющие норму псевдопотенциалы (СНП) [3]. Однако в силу нелокальности СНП при использовании второго метода затруднены расчеты энергии электрон-ионного взаимодействия, что влечет за собой замену нелокальных СНП модельными потенциалами. В отличие от предыдущего, метод ВФ последовательно использует СНП и дает достаточно точные (~3 %) [4] значения частот НК. Существенным его недостатком является то, что метод применим только для расчета частот НК с волновым вектором, соизмеримым с каким-либо вектором обратной решетки, ибо в этом случае искаженная решетка является периодической и возможно проведение самосогласованных зонных расчетов.

В предлагаемой работе на примере кремния со структурой алмаза реализован метод ВФ и рассчитаны частоты НК для двух векторов зоны Бриллюэна в гармоническом приближении; при вычислении гистограммы плотности фононных состояний использовался метод «жестких» ионов Борна — Кармана [5].

1. Расчет энергии связи и постоянной решетки кремния. В [6, 7] выполнен самосогласованный расчет зонной структуры путем решения уравнения Кона — Шема при использовании СНП, а также определены поправки к ширине запрещенной зоны через решения уравнения Дайсона для одноэлектронных возбудений.

Одноэлектронное уравнение Кона — Шема в рамках ФЛП имеет вид:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \epsilon_n(\mathbf{k}) \right] C_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{G}) + \sum_{\mathbf{G}'} V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') C_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{G}') = 0, \quad (1)$$

где $V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}')$ — фурье-компоненты экранированного эффективного псевдопотенциала, которые равны сумме ионного, кулоновского и обменно-корреляционного потенциалов

$$V(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') = V_{\text{ion}}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') + V_{\text{H}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') + V_{\text{xc}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}'), \quad (2)$$

$C_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{G})$ — коэффициенты в разложении псевдоволновой функции по плоским волнам:

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} C_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \exp[i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}]. \quad (3)$$

Ионный потенциал в (2) строился в виде суперпозиции СНП ионов Si^{4+} [3]. Экранирующий кулоновский потенциал вычислялся при помощи псевдозарядовой плотности валентных электронов $\rho(\mathbf{G} - \mathbf{G}')$:

$$V_{\text{H}}(\mathbf{G} - \mathbf{G}') = \frac{4\pi e^2}{|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|^2} \rho(\mathbf{G} - \mathbf{G}').$$

Обменно-корреляционный потенциал в приближении ФЛП рассчитывался по формуле Слэтера

$$V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = -\frac{3e^2}{2} \left[\frac{3}{\pi} \rho(\mathbf{r}) \right]^{1/3}.$$

Уравнение (1) решалось посредством самосогласованной процедуры [7, 8]. При этом фурье-компоненты псевдозарядовой плотности валент-

ных электронов вычислялись методом специальных точек в зоне Бриллюэна:

$$\rho(\mathbf{G}) = \frac{1}{N_T} \sum_{\mathbf{k}_s} \omega_{\mathbf{k}_s} \sum_{j \in T} \exp[ij\mathbf{G}\tau(j)] \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{G}'} C_{\mathbf{n}, \mathbf{k}_s}(\mathbf{G}' + j\mathbf{G}) C_{\mathbf{n}, \mathbf{k}_s}^*(\mathbf{G}'),$$

где $\mathbf{k}_s$ — векторы в зоне Бриллюэна; $\omega_{\mathbf{k}_s}$ — весовые множители этих векторов; j — операции вращений точечной группы кристалла; N_T — порядок данной группы; $\tau(j)$ — неэлементарные трансляции.

Используя рассчитанные собственные значения энергии $\epsilon_n(\mathbf{k}_s)$, а также фурье-компоненты $\rho(\mathbf{G})$ и $V_{xc}(\mathbf{G})$, энергию связи в расчете на один атом можно вычислить следующим образом [8]:

$$E = \frac{1}{N_{\mathbf{k}_s}} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{k}_s} \omega_{\mathbf{k}_s} \epsilon_n(\mathbf{k}_s) - \Omega_0 \sum_{\mathbf{G} \neq 0} [V_H(\mathbf{G}) + V_{xc}(\mathbf{G})] \rho(\mathbf{G}) + \\ + \frac{\Omega_0}{2} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} V_H(\mathbf{G}) \rho(\mathbf{G}) + \Omega_0 \sum_{\mathbf{G}} \epsilon_{xc}(\mathbf{G}) \rho(\mathbf{G}) + \gamma_{E_s} + E' - E_0,$$

где Ω — объем, приходящийся на один атом; γ_{E_s} — энергия Маделунга точечного иона Si^{4+} , которая рассчитывалась по методу Эвальда; E' — энергетическая поправка, обусловленная наличием в локальной части псевдопотенциала иона Si^{4+} с зарядом Z так называемой «отталкивающей» компоненты:

$$E' = \frac{Z}{\Omega_0} \int \left[V_{\text{ion}}^{\text{loc}}(r) + \frac{Z e^2}{r} \right] d^3 r,$$

$\epsilon_{xc}(\mathbf{G})$ — плотность обменно-корреляционной энергии, E_0 — энергия ионизации четырех внешних электронов свободного атома кремния [9]. Равновесное значение постоянной решетки a_0 рассчитывалось в точке минимума функции $E(a)$.

2. Расчет частот НК атомов кремния в точках Γ и X зоны Бриллюэна методом ВФ. Энергия связи по методу ВФ [4] рассчитывается для искаженной кристаллической структуры, которая обусловлена смещением атомов из положения равновесия при их колебательных движениях.

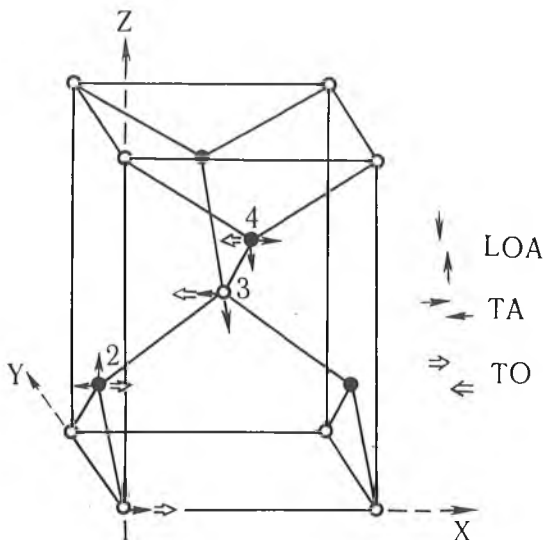


Рис. 1. Расширенная элементарная ячейка кремния

Частоты НК в центре зоны Бриллюэна вычислялись через энергию связи, которая является функцией относительного смещения двух гранцентрированных кубических подрешеток вдоль направления $[111]$. При этом элементарная ячейка искаженной структуры представляет ромбоэдр объемом $\Omega = a_0^3 / 4$, на который приходится два атома (точечная группа D_{3d}).

При расчете частоты НК в точке X зоны Бриллюэна использовалась расширенная элементарная ячейка [10] (рис. 1), которая имеет форму прямоугольного параллелепипеда объемом $\Omega = a_0^3/2$, содержащего четыре атома (точечная группа D_{2h}).

В гармоническом приближении изменение энергии связи при смещении атомов кристалла из положения равновесия можно записать [4]: $\Delta E = k_0 u^2 / 2$, где u — амплитуда НК. Тогда частота нормальных колебаний равна:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_0}{m_0}}.$$

Здесь $k_0 = [d^2(\Delta E)/du^2]_{u=0}$, m_0 — масса атома кремния.

Следует отметить, что при проведении самосогласованных расчетов для получения удовлетворительных результатов необходима достаточно высокая точность вычисления энергии связи E (10^{-24} Дж/атом) и равновесного значения постоянной решетки a_0 (10^{-5} нм). Для этого в разложении (3) использовалось 200 плоских волн.

3. Вычисление дисперсионных кривых частот НК, фононного спектра и температурной зависимости теплоемкости кремния. Для расчета фононного спектра и термодинамических функций кристалла необходимо знать частоты НК для достаточно большого числа точек зоны Бриллюэна. Из первых принципов решить данную задачу невозможно, поскольку необходимы большие затраты машинного времени. Нами предлагается метод расчета фононного спектра, суть которого заключается в следующем. На основании использования модели «жестких ионов» Борна — Кармана [5] определяются значения силовых постоянных посредством привязки к ранее вычисленным методом ВФ частотам НК. Такого рода аппроксимация оправдана, ибо полученная динамическая матрица имеет размерность 6×6 и это существенно упрощает математическую задачу расчета собственных значений эрмитовых матриц. Зная частоты НК в точках Γ и X зоны Бриллюэна, можно определить силовые постоянные только для двух ближайших координационных сфер.

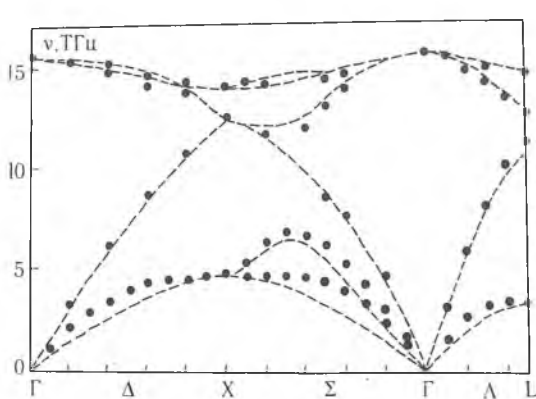


Рис. 2. Дисперсионные кривые частот НК кремния:
---- — расчет, • — эксперимент [11, 12]

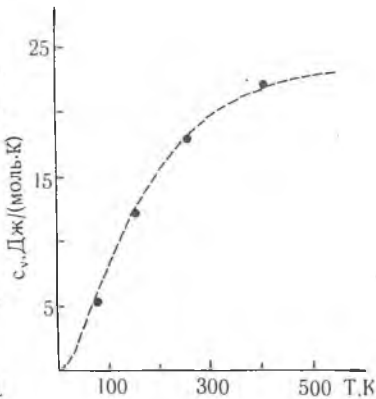


Рис. 3. Температурная зависимость теплоемкости кремния. Обозначения те же, что и на рис. 2

Дисперсионные кривые частот НК, рассчитанные по предлагаемому методу, представлены на рис. 2. Гистограмма плотности фононных состояний вычислялась посредством выбора точек в $1/48$ части зоны Бриллюэна по методу Монте-Карло. Полученная с ее помощью температурная зависимость решеточной теплоемкости кремния изображена на рис. 3.

Таким образом, результаты исследований свидетельствуют о возмож-

ности использования предложенной схемы для проведения первопринципных расчетов термодинамических функций неполярных полупроводниковых кристаллов.

1. К в я т к о в с к и й О. Е., М а к с и м о в Е. Г. // УФН. 1988. Т. 154. Вып. 1. С. 3.
2. Теория неоднородного электронного газа / Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча. М., 1987.
3. B a c h e l e t G. B., H a m a n n D. R., S c h l u t e r M. // Phys. Rev. B. 1992. V.26. № 8. P.4199.
4. Y i n M. T., S o h e n M. L. // Ibid. B. 1982. V.26. №6. P.3259.
5. Б о р н М., Х у а н ь К у н ь. Динамическая теория кристаллических решеток. М., 1958.
6. Р е в и н с к и й А. Ф. // Докл. АН БССР. 1991. Т. 35. № 12. С. 1081.
7. Р е в и н с к и й А. Ф. // Весці АН Беларусі. Сер. фіз.-мат.наук. 1992. № 2. С. 47.
8. S c h e l i k o w s k i J. R., L o u i e S. G. // Phys. Rev. B. 1984. V.29. N 6. P. 3470.
9. Свойства элементов. Ч. 1. Физические свойства / Под ред. Г. В. Самсонова. М., 1976.
10. V a n d e r b i l t D., T a o l e S. H. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 8. P. 5657.
11. N i l s s o n G., N e l i n G. // Ibid. B. 1972. V. 6. N 10. P. 3777.
12. D o l l i n g G. // Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids. IAEA. Vienna, 1963. V. 2. P. 37.
13. Физико-химические свойства полупроводниковых веществ: Справ. М., 1978.

Поступила в редакцию 06.10.93.

УДК 517.925.6

В. Н. ГОРБУЗОВ, Ю. Ю. ГНЕЗДОВСКИЙ

О ПОЛИНОМИАЛЬНЫХ РЕШЕНИЯХ СИСТЕМ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

The set of systems of algebraic ordinary differential equations (1), when the set of polynomials (3) in solution is picked out.

В [1] изложены методы построения полиномиальных решений алгебраических дифференциальных уравнений. Считается, что впервые эта задача рассматривалась в работах [2,3], исследования были продолжены в работах [4—15].

В настоящей статье рассматривается задача о нахождении степеней полиномиальных решений в системах алгебраических дифференциальных уравнений

$$\sum_{i=0}^{N_i} A_{ij}(z) \prod_{k=1}^{M_{ij}} \prod_{r=1}^n \{ \omega, (l_{kij}) \}^{v_{rkij}} = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (1)$$

где l_{kij} и v_{rkij} — целые неотрицательные числа, коэффициенты $A_{ij}(z) = \alpha_{ij} z^{a_{ij}} + \dots$, $\alpha_{ij} \neq 0$.

В основу рассуждений положена асимптотическая формула выражения производной полинома $w^{(1)}(z)$ через сам полином $w(z)$ степени $\deg w(z) = m \geq 1$ вида:

$$w^{(1)}(z) = (-1)^1 (-m)_1 z^{-1} w(z) \{ 1 + \epsilon_1(z) \}, \quad (2)$$

где $\epsilon_1(z)$ — рациональная функция такая, что $\epsilon_0(z) = 0$ и $\epsilon_1(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$, $(-m)_1$ — символ Похгаммера.

Полиномиальные решения системы (1) будем искать в виде:

$$w_r = w_r(z), \quad \tau = \overline{1, n}, \quad (3)$$

где $w_r(z)$ — полиномы степени $\deg w_r(z) = m_r \geq \Lambda_r$, $\Lambda_r = \max \{ \Lambda_{rj} : i = \overline{0, N_j}, j = \overline{1, n} \}$ — порядок системы (1) по переменной w_r , $\Lambda_{rj} = \max \{ l_{kij} : k = \overline{1, M_{ij}} \}$ — порядок i -го члена j -го уравнения по переменной w_r .

Для дальнейших рассуждений введем следующие условные обозначения: $\sum_{k=1}^{M_{ij}} v_{rkij} = \kappa_{rij}$ — размерность, $\sum_{k=1}^{M_{ij}} l_{kij} v_{rkij} = \Omega_{rij}$ — вес i -го члена j -го уравнения по переменной w_r ; $\sum_{r=1}^n \Omega_{rij} = \Omega_{ij}$ — вес i -го члена j -го уравнения;

$S_{ij}(m_r) = \sum_{r=1}^n \kappa_{rij} m_r - \Omega_{ij}$ — функция степени i -го члена j -го уравнения,

$$m_r \geq \Lambda_r, \tau = \overline{1, n}; \quad k_{ij}(m_r) = (-1)^{a_{ij}} \prod_{k=1}^{M_{ij}} \prod_{r=1}^n \{ (-m_r) l_{kij} \}^{v_{rkij}}$$

— функция коэффициента i -го члена j -го уравнения, $m_r \geq \Lambda_r$, $\tau = \overline{1, n}$.

Заметим, что ограничения на степени m_j полиномиальных составляющих решения (3) общности рассуждений не нарушают, ибо в таких случаях рассматриваются «укороченные» системы из (1).

Теорема 1. Пусть для j -го уравнения системы (1) выполняются условия:

$$\kappa_{rj} = \kappa_{rj} = \dots = \kappa_{r+\lambda_j} > \kappa_{rj}, \quad r \in \{1, \dots, n\}, \quad (4)$$

$$0 \leq \rho \leq N_j, \quad \theta = \overline{0, \rho-1}, \quad f_r = \overline{\rho + \lambda_r + 1, N_j};$$

$$\kappa_{rj} = \dots = \kappa_{r+\lambda_j}, \quad 0 \leq \lambda_r \leq \lambda_r, \quad \tau = \overline{1, n}, \quad \tau \neq r, \quad (5)$$

$$\alpha_{rj} - \Omega_{rj} > \alpha_{lj} - \Omega_{lj}, \quad l = \overline{\rho+1, \rho+\lambda}, \quad \lambda = \min \{ \lambda_r : \tau = \overline{1, n} \}. \quad (6)$$

Тогда относительно существования полиномиальных решений (3) справедливы следующие утверждения:

- 1) при $\rho = 0, \lambda = N_j$ решений (3) нет;
- 2) при $\rho = 0, \lambda < N_j$ степени m_j могут быть лишь такими, что выполняется хотя бы одно из неравенств

$$\sum_{r=1}^n (\kappa_{rj} - \kappa_{rj}) m_r \geq (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}) - (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}), \quad \eta = \overline{\lambda+1, N_j}; \quad (7)$$

- 3) при $0 < \rho \leq N_j, \lambda = N_j - \rho$ степени m_j могут быть лишь такими, что выполняется хотя бы одно из неравенств

$$\sum_{r=1}^n (\kappa_{rj} - \kappa_{rj}) m_r \geq (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}) - (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}), \quad \theta = \overline{0, \rho-1}; \quad (8)$$

- 4) при $0 < \rho < N_j, \lambda < N_j - \rho$ степени m_j , при которых выполняются неравенства

$$\sum_{r=1}^n (\kappa_{rj} - \kappa_{rj}) m_r < (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}) - (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}), \quad \eta = \overline{\rho + \lambda + 1, N_j}, \quad (9)$$

могут быть лишь такими, что выполняется хотя бы одно из неравенств (8);

- 5) при $0 < \rho < N_j, \lambda < N_j - \rho$ степени m_j , при которых выполняются неравенства

$$\sum_{r=1}^n (\kappa_{rj} - \kappa_{rj}) m_r < (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}) - (\alpha_{rj} - \Omega_{rj}), \quad \theta = \overline{0, \rho-1}, \quad (10)$$

могут быть лишь такими, что выполняется хотя бы одно из неравенств (7) при $\eta = \overline{\rho+1+\lambda, N_j}$.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Основываясь на асимптотической формуле (2), устанавливаем, что система полиномов (3) является решением системы (1) тогда и только тогда, когда совместна система тождеств:

$$\begin{aligned} & \sum_{\theta=0}^{s-1} K_{\theta j}(m_r) K_{\theta j}^{-1}(m_r) A_{\theta j}(z) A_{\theta j}^{-1}(z) (1 + \varepsilon_{\theta j}(z)) \times \\ & \times \exp_2 \{ S_{\theta j}(m_r) - S_{\theta j}(m_r) \} + \varepsilon_{\theta j}(z) + 1 + \sum_{l=\rho+1}^{\rho+\lambda} K_{lj}(m_r) K_{lj}^{-1}(m_r) \times \\ & \times A_{lj}(z) A_{lj}^{-1}(z) (1 + \varepsilon_{lj}(z)) \exp_2 \{ \Omega_{lj} - \Omega_{lj} \} + \\ & + \sum_{r=\rho+\lambda+1}^{N_j} K_{rj}(m_r) K_{rj}^{-1}(m_r) A_{rj}(z) A_{rj}^{-1}(z) (1 + \varepsilon_{rj}(z)) \times \\ & \times \exp_2 \{ S_{rj}(m_r) - S_{rj}(m_r) \} = 0, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\varepsilon_{ij}(z) \rightarrow 0$ при $z \rightarrow \infty$.

Так как для всех $l = \overline{\rho+1, \rho+\lambda}$ выполняется (6), то при $z \rightarrow \infty$

$$A_{ij}(z)A_{ij}^{-1}(z)\exp_z\{\Omega_{ij}-\Omega_{ij}\}\rightarrow 0. \quad (12)$$

Если для всех $\theta = \overline{0, \rho-1}$ выполняются неравенства $\sum_{\tau=1}^n (\kappa_{\theta j} - \kappa_{\tau j})m_{\tau} + \Omega_{\theta j} - \Omega_{\tau j} + \alpha_{\theta j} - \alpha_{\tau j} = 0$, то при $z \rightarrow \infty$

$$A_{\theta j}(z)A_{ij}^{-1}(z)\exp_z\{S_{\theta j}(m_{\tau}) - S_{ij}(m_{\tau})\} \rightarrow 0. \quad (13)$$

Если для всех $\eta = \overline{\rho + \lambda + 1, N_j}$ выполняются неравенства $\sum_{\tau=1}^n (\kappa_{\eta j} - \kappa_{\tau j}) \times m_{\tau} + \Omega_{\eta j} - \Omega_{\tau j} + \alpha_{\eta j} - \alpha_{\tau j} < 0$, то при $z \rightarrow \infty$

$$A_{\eta j}(z)A_{ij}^{-1}(z)\exp_z\{S_{\eta j}(m_{\tau}) - S_{ij}(m_{\tau})\} \rightarrow 0. \quad (14)$$

В каждом из случаев 1)–5), переходя в (11) к пределу при $z \rightarrow \infty$, с учетом соотношений (12)–(14) всякий раз получаем противоречие, которое и доказывает утверждения теоремы.

Методом, аналогичным доказательству теоремы 1, устанавливаем, что справедливы

Теорема 2. Пусть для j -го уравнения системы (1) выполняются условия (4)–(5) и

$$\alpha_{\rho j} - \Omega_{\rho j} = \dots = \alpha_{\rho+Sj} - \Omega_{\rho+Sj} > \alpha_{\lambda j} - \Omega_{\lambda j}, \quad 0 < S \leq \lambda,$$

$$\varepsilon = \overline{\rho+S+1, \rho+\lambda}, \quad \lambda = \min\{\lambda_{\tau} : \tau = \overline{1, n}\}.$$

Тогда относительно существования полиномиальных решений (3) справедливы следующие утверждения:

1) при $\rho = 0$, $\lambda = N_j$ степени m_{τ} должны удовлетворять равенству

$$\sum_{\tau=\rho}^{\rho+S} \alpha_{\tau j} K_{\tau j}(m_{\tau}) = 0; \quad (15)$$

2) при $\rho = 0$, $\lambda < N_j$ степени m_{τ} такие, что выполняются неравенства (9), должны удовлетворять равенству (15);

3) при $0 < \rho < N_j$, $\lambda = N_j - \rho$ степени m_{τ} такие, что выполняются неравенства (10), должны удовлетворять равенству (15);

4) при $0 < \rho < N_j$, $\lambda < N_j - \rho$ степени m_{τ} такие, что выполняются неравенства (9) и (10), должны удовлетворять равенству (15).

1. Горбузов В. Н. Полиномиальные решения алгебраических дифференциальных уравнений. Гродно, 1991.

2. Rainville E. D. // Amer. Math. Monthly. 1936. V. 43. P. 473.

3. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М., 1976. С. 44.

4. Bhargava M., Kaufman H. // Coll. Math. 1966–1967. V. 18. P. 3.

5. Лазов П. Р. // Бил. Друшт. мат. и физ. СРМ. 1974. Кн. 25. С. 41.

6. Лазов П. Р. // Math. Balkanica. 1975. V. 35. № 5. P. 189.

7. Лазов П. Р. // Математички весник. 1977. Кн. 1(14, 29). С. 387.

8. Лазов П. Р., Дмитровски Д. // Дифференц. уравнения. 1977. Т. 13. № 6. С. 1131.

9. Самуилов А. З. // Дифференц. уравнения. 1971. Т. 7. № 12. С. 2287.

10. Орещенко Л. Г. // Дифференц. уравнения. 1974. Т. 10. № 2. С. 253.

11. Горбузов В. Н., Денисковец А. А. // Докл. АН БССР. 1982. Т. 26. № 9. С. 776.

12. Горбузов В. Н., Кишкель С. И. // Дифференц. уравнения. 1987. Т. 23. № 5. С. 891.

13. Горбузов В. Н., Крушельницкий А. А. // Дифференц. уравнения. 1989. Т. 25. № 6. С. 1069.

14. Горбузов В. Н., Немец В. С. // Punime Mat. 1988. № 3. P. 23.

15. Gorbuзов V. N., Samodurov A. A. // Inst. Math. Univ. 1989. № 8. P. 1.

Поступила в редакцию 28.09.92.

МНОГОМЕРНЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ С ФУНКЦИОНАЛЬНО-КОММУТАТИВНЫМ ОПЕРАТОРОМ

In the present paper we consider the properties of the solution of the many-dimensional linear differential equation with special perturbation.

Пусть G — область в R^m , $x \in G$, $y \in R^n$, $L(R^m; R^n)$ — пространство линейных операторов, действующих из R^m в R^n , $P(x)$ — непрерывно дифференцируемая операторная функция, заданная в G и со значениями в пространстве $L(R^m; L(R^n; R^n))$. Рассмотрим многомерное линейное дифференциальное уравнение

$$y'(x)h = P(x)hy(x) \quad (1)$$

и будем предполагать, что это уравнение вполне интегрируемо.

В данной работе ставится задача ввести понятие функционально-коммутирующего оператора $P(x)$ и исследовать некоторые свойства решений уравнения (1) с такими операторами.

Определение. Оператор $P(x)$ будем называть функционально-коммутирующим, если для $\forall x, s \in G$ и $\forall h, k \in R^m$

$$P(x)hP(s)k = P(s)kP(x)h. \quad (2)$$

В [4, С. 46] было введено понятие функционально-коммутирующей квадратной матрицы нескольких переменных. Следующая лемма устанавливает зависимость между функциональной коммутируемостью оператора $P(x)$ и функциональной коммутируемостью матриц $P_i(x)$ ($i = \overline{1, m}$).

Лемма. Оператор $P(x)$ будет функционально-коммутирующим тогда и только тогда, когда все матрицы $P_i(x)$ ($i = \overline{1, m}$) функционально-коммутируемы и имеет место условие

$$P_i(x)P_j(x) = P_j(x)P_i(x), \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Доказательство. Необходимость очевидным образом следует из того, что условие (2) в координатной форме равносильно условию

$$P_i(x)P_j(s) = P_j(s)P_i(x), \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Докажем достаточность. Так как $P_i(x)$ ($i = \overline{1, m}$) — функционально-коммутирующие матрицы и, следовательно [4, С. 46],

$$P_i(x) = \sum_{p=1}^{m_i} P_{ip} \varphi_{ip}(x),$$

где P_{ip} — попарно-коммутирующие линейно независимые матрицы, $\varphi_{ip}(x)$ — линейно независимые функции, то условия полной интегрируемости запишутся в виде:

$$\frac{\partial \sum_{p=1}^{m_i} P_{ip} \varphi_{ip}(x)}{\partial x_j} = \frac{\partial \sum_{p=1}^{m_j} P_{jp} \varphi_{jp}(x)}{\partial x_i},$$

где $i, j = \overline{1, m}$. Тогда

$$P_{il} \frac{\partial \sum_{p=1}^{m_j} P_{jp} \varphi_{jp}(x)}{\partial x_i} = \frac{\partial \sum_{p=1}^{m_j} P_{jp} \varphi_{jp}(x)}{\partial x_i} P_{il},$$

где $l = \overline{1, m_i}$, откуда и следует, что оператор $P(x)$ функционально-коммутирующ.

Замечание. Фундаментальное решение уравнения (1) с функционально-коммутирующим оператором может быть получено в виде [4, С. 47]:

$$Y(x) = \exp \int_{x_0}^x P(v) dv.$$

Теорема 1. (Аналог теоремы Г. Н. Чеботарева.) Функционально-ком-

мутативную матрицу $A(x_1, \dots, x_m)$ постоянным преобразованием можно привести к блочно-треугольному виду, где каждый диагональный блок имеет единственное собственное значение.

Доказательство аналогично случаю одной независимой переменной [5].

Теорема 2. Уравнение (1) с функционально-коммутативным оператором $P(x)$ преобразованием $\zeta = C u$ приводится к блочно-треугольному виду:

$$d\zeta = CP_1(x)C^{-1}\zeta dx_1 + \dots + CP_m(x)C^{-1}\zeta dx_m,$$

где $CP_1(x)C^{-1}$ — блочно-треугольные матрицы и каждый блок оператора $P^{(i)}(x)$ этого уравнения имеет единственный собственный функционал.

Доказательство теоремы 2 следует из леммы и теоремы 1.

Совместно с (1) рассмотрим следующее уравнение:

$$z'(x)h = (P(x) + B(x))hz(x), \quad (3)$$

где $B(x)$ — непрерывно дифференцируемая операторная функция, заданная в G , и со значениями в пространстве $L(R^m; L(R^n; R^n))$.

Рассмотрим также уравнение

$$dz = A_1(x)P_1(x)zdx_1 + \dots + A_m(x)P_m(x)zdx_m, \quad (4)$$

где $A_i(x)$ ($i = \overline{1, m}$) — матрицы размерности $n \times n$, как частный случай уравнения (3), где $B_i(x) = (A_i(x) - E)P_i(x)$.

Будем предполагать, что уравнение (3) также вполне интегрируемо, а областью определения G далее везде будем считать замкнутый выпуклый телесный выступающий конус K [1. С. 12].

1. Пусть оператор $P(x)$ уравнения (1) функционально-коммутативный. Имеют место следующие теоремы.

Теорема 3. Если оператор $B(x)$ — функционально-коммутативный и выполняется условие

$$P_i(x)B_j(s) = B_j(s)P_i(x), \quad i, j = \overline{1, m}, \quad (5)$$

а также

$$\| \int_{x_0}^x B(v)dv \| \leq m_1 < +\infty, \quad (6)$$

то некоторое фундаментальное решение уравнения (3) представляется в виде:

$$Z(x) = L(x) \exp \int_{x_0}^x P(v)dv,$$

где $L(x)$ — матрица Ляпунова [1. С. 73].

Доказательство. Учитывая условия теоремы и лемму, получаем, что $\int_{x_0}^x P(v)dv$ и $\int_{x_0}^x B(v)dv$ перестановочны и поэтому

$$Z(x) = \exp \int_{x_0}^x (P(v) + B(v))dv = \exp \int_{x_0}^x B(v)dv \cdot \exp \int_{x_0}^x P(v)dv. \quad (7)$$

Из выполнения условия (6) следует, что $L(x) = \exp \int_{x_0}^x B(v)dv$

— матрица Ляпунова. Теорема доказана.

Будем считать далее, что операторная функция $P(x)$, а также матрицы $A_i(x)$ ($i = \overline{1, m}$) ограничены на K .

Теорема 4. Если оператор $B(x)$ — функционально-коммутативный, выполняется условие (5) и

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \|x\|^{-1} \cdot \left\| \int_{x_0}^x B(v)dv \right\| = 0,$$

то некоторое фундаментальное решение уравнения (3) представляется в виде:

$$Z(x) = S(x) \exp \int_{x_0}^x P(v) dv,$$

где матрица $S(x)$ обобщенно ограничена [1. С. 96].

Д о к а з а т е л ь с т в о. Так же, как в теореме 3, получаем, что справедливо (7). Очевидно, что функция $\exp \left\| \int_{x_0}^x B(v) dv \right\|$ имеет единственный нулевой характеристический вектор [2]. Тогда все координаты любого характеристического вектора операторных функций $S(x) = \exp \int_{x_0}^x B(v) dv$ и $S^{-1}(x) = \exp \left(- \int_{x_0}^x B(v) dv \right)$ неотрицательны. Так как $S(x)S^{-1}(x) = E$ имеет единственный нулевой характеристический вектор, то все координаты некоторого характеристического вектора функции $\|S(x)\| \|S^{-1}(x)\|$ неположительны. Откуда [1. С. 88] получаем, что $\exp \int_{x_0}^x B(v) dv$ обобщенно ограничена.

Следствие. При условиях теоремы 4 характеристическое множество любого решения уравнения (3) совпадает с характеристическим множеством некоторого решения уравнения (1).

Теорема 5. Если выполняются условия:

$$A_i(x)A_j(s) = A_j(s)A_i(x), \quad i, j = \overline{1, m},$$

$$A_i(x)P_j(s) = P_j(s)A_i(x),$$

а также

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \alpha_{ij}(x) = c, \quad c > 0, \quad (8)$$

где $\alpha_{ij} (j = \overline{1, n})$ — собственные значения матрицы $A_i(x) (i = \overline{1, m})$ и λ — характеристический вектор некоторого решения уравнения (1), то $\mu = c\lambda$ является характеристическим вектором некоторого решения уравнения (4).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Уравнения (1) и (4) одним и тем же постоянным преобразованием C приводятся к блочно-треугольному виду, где каждый диагональный блок матриц CA_iC^{-1} и CP_iC^{-1} имеет единственное собственное значение. Пусть уже исходные уравнения имеют указанный блочно-треугольный вид:

$$Q(x) = \int_{x_0}^x P(v) dv = \text{diag} \{ Q_{11}(x), \dots, Q_{kk}(x) \}.$$

Рассматривая блоки матриц $\exp Q(x)$, получаем, что характеристические множества функций $\exp Q_{jj}(x)$ и $\exp \zeta_j^{(r)}(x)$, где

$$\zeta_j^{(r)}(x) = \int_{x_0}^x \zeta_{1j}(x) dx_1 + \dots + \zeta_{mj}(x) dx_m$$

— собственное значение j -го блока матрицы $Q(x)$, а $\zeta_{ij}(x) (j = \overline{1, k})$ — собственные значения блоков матрицы $P_i(x)$, совпадают.

Принимая во внимание условие (8), получаем:

$$\begin{aligned} \eta_j(x) &= \int_{x_0}^x \alpha_{1j}(x) \zeta_{1j}(x) dx_1 + \dots + \alpha_{mj}(x) \zeta_{mj}(x) dx_m = \\ &= c \int_{x_0}^x \zeta_{1j}(x) dx_1 + \dots + \zeta_{mj}(x) dx_m + \int_{x_0}^x f_{1j}(x) \zeta_{1j}(x) dx_1 + \dots + \\ &\quad + f_{mj}(x) \zeta_{mj}(x) dx_m, \end{aligned}$$

где $\eta_j(x)$ — собственное значение j -го блока матрицы $\int_{x_0}^x A_1 P_1 dx_1 + \dots +$

$+ A_m P_m dx_m$, $\alpha_{ij}(x)$ ($j = \overline{1, k}$) — собственные значения j -го блока матрицы $A_i(x)$, и $\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} f_{ij}(x) = 0$ ($i = \overline{1, m}$, $j = \overline{1, k}$).

Так как при этих условиях

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \|x\|^{-1} \cdot \int_{x_0}^x f_{1j}(x) \zeta_{1j}(x) dx_1 + \dots + f_{mj}(x) \zeta_{mj}(x) dx_m = 0,$$

то непосредственно из определения характеристического вектора получаем утверждение теоремы.

Следствие. Если уравнение (1) правильное, то уравнение (4) также правильное.

2. Рассмотрим теперь уравнение (1) с оператором Лаппо-Данилевского [1. С. 63]. Оператор $P(x)$ заведомо является оператором Лаппо-Данилевского, если он функционально коммутативен, но может оказаться таким и в более общих случаях.

Теорема 6. Если выполняются условия:

$$\int_{x_0}^x P(v) dv \cdot B_i(x) = B_i(x) \int_{x_0}^x P(v) dv, \quad i = \overline{1, m} \quad (9)$$

и

$$\begin{aligned} \lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \|x\|^{-1} \left(\int_{x_0}^{x_1} \|B_1(x_1, x_{02}, \dots, x_{0m})\| dx_1 + \dots + \right. \\ \left. + \int_{x_{0m}}^{x_m} \|B_m(x_1, x_2, \dots, x_m)\| dx_m \right) = 0, \end{aligned}$$

то некоторое фундаментальное решение уравнения (3) представляется в виде: $Z(x) = \exp \int_{x_0}^x P(v) dv \cdot S(x)$, где матрица $S(x)$ обобщенно ограничена.

Доказательство. Так как (1) — уравнение Лаппо-Данилевского, то [1. С. 63] $Y(x) = \exp \int_{x_0}^x P(v) dv$ — его фундаментальное решение.

Обозначим

$$\exp \left(- \int_{x_0}^x P(v) dv \right) Z(x) = S(x),$$

где $Z(x)$ — фундаментальный оператор уравнения (3). Используя метод вариации произвольной постанной и неравенство вида Гронуолла [3], получаем:

$$\begin{aligned} \|S(x)\| \leq C_1 \exp \left(\int_{x_{01}}^{x_1} \|B_1(x_1, x_{02}, \dots, x_{0m})\| dx_1 + \dots + \right. \\ \left. + \int_{x_{0m}}^{x_m} \|B_m(x_1, x_2, \dots, x_m)\| dx_m \right), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|S^{-1}(x)\| \leq C_2 \exp \left(\int_{x_{01}}^{x_1} \|B_1(x_1, x_{02}, \dots, x_{0m})\| dx_1 + \dots + \right. \\ \left. + \int_{x_{0m}}^{x_m} \|B_m(x_1, x_2, \dots, x_m)\| dx_m \right). \end{aligned}$$

Используя последние 2 неравенства, аналогично, как в теореме 4, получаем, что матрица $S(x)$ обобщенно ограничена. Теорема доказана.

Следствие 1. Если решения уравнения (1) Лаппо-Данилевского ограничены, выполняется условие (9) и

$$\int_{x_{01}}^{x_1} \|B_1(x_1, x_{02}, \dots, x_{0m})\| dx_1 + \dots +$$

$$+ \int_{x_{0m}}^{x_m} \| B_m(x_1, x_2, \dots, x_m) \| dx_m < +\infty, \quad (10)$$

то решения уравнения (3) также ограничены.

Следствие 2. Если решения уравнения Лапко-Данилевского (1) ограничены, выполняются условия (9) и (10), а также

$$\lim_{\|x\| \rightarrow \infty} \operatorname{Sp} \int_{x_0}^x P(v) dv \geq I > -\infty,$$

то некоторое фундаментальное решение уравнения (3) представляется в виде: $Z(x) = L(x)Y(x)$, где $L(x)$ — матрица Ляпунова.

1. Г а й ш у н И. В. Вполне разрешимые многомерные дифференциальные уравнения. Мн., 1983.

2. Г р у д о Э. И. Характеристические векторы функций многих переменных // Докл. АН БССР. Т. 18. № 1. 1974. С. 5.

3. Г р у д о Э. И., Я н ч у к Л. Ф. Неравенства вида Гронуолла, Бихари и Лангенхопа для систем Пфаффа // Дифференц. уравнения. 1977. Т. 13. № 4. С. 752.

4. П е т р о в с к и й Г. Н. О матрицах, коммутирующих со своими частными производными // Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1979. № 4. С. 46.

5. Ч е б о т а р е в Г. Н. К решению в замкнутой форме краевой задачи Римана для системы п пар функций // Уч. зап. Казан. ун-та. 1956. Т. 116. Кн. 4. С. 34.

Поступила в редакцию 14.05.93.

УДК 517.983.53

А. П. ШИЛИН

К РЕШЕНИЮ В ЗАМКНУТОЙ ФОРМЕ ДИСКРЕТНЫХ УРАВНЕНИЙ ТИПА СВЕРТКИ С ПОЧТИ СТАБИЛИЗИРУЮЩИМИСЯ МНОЖИТЕЛЯМИ

Some methods of solving the discrete equations of convolution type with the multipliers of kind $(-1)^n$ are indicated.

Дискретные уравнения типа свертки, в том числе имеющие приложения, рассматривались, например, в [1—3]. Отметим работы А. И. Тузика [4, 5], в которых изучались уравнения с почти стабилизирующимися множителями $(-1)^n$. Уравнения с этими множителями А. И. Тузик исследовал на нетеровость, привел способ сведения их к системе двух полных сингулярных интегральных уравнений с ядром Коши, выделил некоторые частные случаи, допускающие решение в замкнутой форме. Укажем близкие уравнения, также допускающие решение в замкнутой форме:

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{n-k} x_k + \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k b_k x_{n+k} + (-1)^n \operatorname{sgn}(0,5-n) \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k b_{k-n} x_k = f_n, \quad (1)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{n-k} x_k + (-1)^n \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_{k-n} x_k + (-1)^n \operatorname{sgn}(0,5-n) \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_{k-n} x_k = f_n, \quad (2)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{n-k} x_k + \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k b_{k-n} x_k +$$

$$+ \operatorname{sgn}(0,5 - n) \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k b_{k-n} x_k = f_n, \quad (3)$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} a_{n-k} x_k + \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_{k-n} x_k + \operatorname{sgn}(0,5 - n) \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_{k-n} x_k = f_n, \quad (4)$$

где $n \in \mathbb{Z}$.

Последовательности a_n, b_n, f_n возьмем, а последовательности x_n будем искать в классе $\{1\}$, введенном в монографии [1]. Как и в этой монографии, обозначаем далее преобразования Лорана последовательностей соответствующими заглавными буквами. Значки «+» и «-» обозначают далее преобразования Лорана соответствующих односторонних последовательностей и одновременно аналитическую продолжимость функций во внутренность и внешность единичной окружности.

Преобразуя уравнения (1)–(4) по Лорану, получим соответственно:

$$A(t)X^+(t) + B(-t^{-1})X(t) + \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau)X(-\tau^{-1})d\tau}{\tau + t^{-1}} = F(t), \quad (5)$$

$$A(t)X^+(t) + B(-t^{-1})X(-t) + \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau)X(\tau^{-1})d\tau}{\tau + t^{-1}} = F(t), \quad (6)$$

$$A(t)X^+(t) + B(t^{-1})X(-t) + \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau)X(-\tau^{-1})d\tau}{\tau - t^{-1}} = F(t), \quad (7)$$

$$A(t)X^+(t) + B(t^{-1})X(t) + \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau)X(\tau^{-1})d\tau}{\tau - t^{-1}} = F(t), \quad (8)$$

где $|t|=1$.

Это полные сингулярные интегральные уравнения (причем уравнения (6) и (7) еще и со сдвигом); близкие к ним встречались в работах [6, 7]. Введем интеграл типа Коши $\Psi(z)$, равный в случае уравнений (5)–(8) соответственно

$$\frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(-\tau^{-1})X(\tau)d\tau}{\tau(\tau-z)}, \quad \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(-\tau^{-1})X(-\tau)d\tau}{\tau(\tau-z)},$$

$$\frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau^{-1})X(-\tau)d\tau}{\tau(\tau-z)}, \quad \frac{1}{\pi i} \int_{|r|=1} \frac{B(\tau^{-1})X(\tau)d\tau}{\tau(\tau-z)}.$$

Выражая $\Psi^-(t)$ по формуле Сохоцкого, уравнения (5)–(8) запишем в виде краевой задачи Римана:

$$X^+(t) = \frac{t}{A(t)} \Psi^-(t) + \frac{F(t)}{A(t)}, \quad (9)$$

откуда следует найти функцию $X^+(t)$.

Теперь выразим плотность интеграла типа Коши $\Psi(z)$ по формуле Сохоцкого. Используя соотношения $X(t) = X^+(t) - X^-(t)$ и (9), получим еще либо задачу Римана, либо задачу Газемана со сдвигом $-t$. Приведем эту задачу лишь для уравнения (5):

$$\Psi^+(t) = -\frac{2B(-t^{-1})}{t} X^-(t) + \left[\frac{2B(-t^{-1}) + A(t)}{t} X^+(t) - \frac{F(t)}{t} \right]. \quad (10)$$

Вполне аналогичные задачи для уравнений (6)–(8) выписывать здесь не будем.

Из задачи (10) — при разрешимости задачи (9) — следует найти функцию $X^-(t)$. Наконец, при разрешимости и задачи (10), найдем решение исходного уравнения:

$$x_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{|t|=1} \frac{X^+(t) - X^-(t)}{t^{n+1}} dt, \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (11)$$

Более точные результаты для уравнений (1)–(4) можно получить,

накладывая на последовательности a_n, b_n различные ограничения. Такими ограничениями могут быть равенства нулю всех членов этих последовательностей либо с отрицательными, либо с неотрицательными индексами. Иллюстрируя сказанное, подробнее рассмотрим уравнение (1), если в нем $a_n = b_n = 0$ при $n < 0$. В этом случае уравнению (1) можно придать вид:

$$0,5 (1 + \operatorname{sgn} (0,5 + n)) \sum_{k=0}^n a_{n-k} x_k + \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k b_k x_{n+k} + (-1)^n \operatorname{sgn} (0,5 - n) \sum_{k=n}^{\infty} (-1)^k b_{k-n} x_k = f_n. \quad (12)$$

Функции $A(t)$ и $B(t)$ теперь аналитически продолжимы в единичный круг. Желая для простоты избежать исключительных случаев Римана задач (9) и (10), считаем в дальнейшем $A(t) \neq 0, B(t) \neq 0, |t| = 1$. Это приводит, очевидно, к конечному числу нулей у функций $A(z)$ и $B(z), |z| < 1$. Обозначим нули функции $A(z)$ через z_l , их кратности — $\mu_l, l = \overline{1, p}$. Нули функции $B(z)$ обозначим ζ_s , кратности их пусть будут $\nu_s, s = \overline{1, q}$. Для определенности будем считать, что $B(0) \neq 0$.

Аналитическая продолжимость функций $A(t)$ и $B(t)$ позволяет решить задачи Римана (9) и (10) сравнительно просто, не обращаясь к общим формулам, например из [3]. Обратное преобразование Лорана (11) может быть затем выражено через исходные величины. Опуская принципиально несложные, но громоздкие выкладки, использующие свойства обратного преобразования Лорана из [1, 5], приведем сразу окончательный результат.

Теорема. Для разрешимости уравнения (12) необходимы и достаточны условия:

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} f_k z_l^k + g = 0, \quad \sum_{k=1}^{\infty} f_k k^{\alpha} z_l^k = 0, \quad \alpha = \overline{1, \mu_l - 1}, \quad l = \overline{1, p}; \\ \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[2 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m b_m \left(\sum_{j=0}^{\infty} c_{m-k-j} f_j + g c_{m-k} \right) - f_{-k} \right] k^{\beta} \zeta_s^k = 0, \\ \beta = \overline{0, \nu_s - 1}, \quad s = \overline{1, q}. \end{aligned}$$

При их выполнении решение уравнения (12) единственно и дается формулами:

$$\begin{aligned} x_n = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} c_{n-k} f_k - \frac{1}{2} g c_n - \frac{1}{2} \sum_{k=-\infty}^{-1} d_{n-k} f_k + \\ + \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_{n-k} \operatorname{sgn} (0,5 + k) \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m b_m \left(\sum_{j=0}^{\infty} c_{k+m-j} f_j + g c_{k+m} \right), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} g = -2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k c_k b_k, \quad c_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{|t|=1} \frac{dt}{A(t)t^{n+1}}, \\ d_n = \frac{1}{2\pi i} \int_{|t|=1} \frac{dt}{B(-t^{-1})t^{n+1}}, \quad n \in \mathbb{Z}. \end{aligned}$$

1. Гахов Ф. Д., Черский Ю. И. Уравнения типа свертки. М., 1978.
2. Карапетянц Н. К., Самко С. Г. Уравнения с инволютивными операторами и их приложения. Ростов н/Д, 1988.
3. Гахов Ф. Д. Краевые задачи. М., 1977.
4. Тузик А. И. // Докл. АН Беларуси. 1993. Т. 37. № 2. С. 118.
5. Он же // Дифференц. уравнения. 1989. Т. 25. № 8. С. 1462.
6. Черский Ю. И. // Докл. АН УССР. Сер. А. 1980. № 12. С. 15.
7. Шилин А. П. // Дифференц. уравнения. 1983. Т. 19. № 12. С. 2187.

Поступила в редакцию 01.06.93.

ОБ ОДНОМ КЛАССЕ МЕТОДОВ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

A new class of explicit methods for numerical solution of systems of ordinary differential equations (including stiff systems) is proposed. These methods are oriented to the procedure of linearization of autonomous systems at each step of integration. In this class a degree of approximating matrix polynomial for a given step of integration is controlling parameter.

При разработке методов численного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$u' = f(u), \quad (1)$$

где $u = (u_1, \dots, u_n)^T$, $f = (f_1, \dots, f_n)^T$, $f_i = f_i(u)$, $u_i = u_i(t)$, $i = 1, 2, \dots, n$, определяющим фактором (особенно в случае жестких [1] систем) часто является не столько достижение высокого порядка аппроксимации дифференциальной задачи разностной, сколько обеспечение должного уровня согласованности в качественном поведении решений этих задач (см., напр., [2]). При этом обычно условия такой согласованности формулируются применительно к системе

$$u' = Au + a \quad (2)$$

с постоянными матрицей A и вектором a . Такой выбор обусловлен не только наличием богатой информации о структуре решений, но, главным образом, тем, что системы именно такого типа возникают при пошаговой линейризации (1), что часто кладут в основу стратегии разработки вычислительного алгоритма. Актуальность численных методов, ориентированных на системы вида (2), обуславливается, кроме того, и прямым выходом таких методов через идею установления на основные задачи линейной алгебры, имеющие в вычислительной практике наиболее широкое распространение.

Учитывая, что на шаге $\tau > 0$ значения точного решения системы (2) связаны соотношением

$$u(t + \tau) = \exp(A\tau)u(t) + \int_0^\tau \exp(Ax)dx a, \quad (3)$$

приближенное решение можно искать в виде

$$\hat{y} = E(A, \tau)y + S^*(A, \tau)a, \quad (4)$$

где $y \approx u(t)$, $\hat{y} \approx u(t + \tau)$, а матрицы $E(A, \tau)$ и $S^*(A, \tau)$ являются некоторыми аппроксимациями соответственно матричной экспоненты и интеграла от нее из (3). Однако даже при очень высоких порядках погрешностей таких аппроксимаций метод (4) может оказаться ущербным [3]. Чтобы предопределить более высокий уровень качественной согласованности разностного решения с точным, обратим внимание на локальную (на отрезке между соседними узлами сетки) согласованность дифференциальной и разностной задач. Для этого рассмотрим связанную с разностным решением (4) дифференцируемую функцию $z(x) = y(t + x)$ непрерывного аргумента $x \in [0, \tau]$ ($z(0) = y(t) = y$, $z(\tau) = y(t + \tau) = \hat{y}$):

$$y(t + x) = E(A, x)y + S^*(A, x)a, \quad E(A, 0) = I, \quad S^*(A, 0) = 0. \quad (5)$$

Здесь через 0 и I обозначены соответственно нулевая и единичная матрицы порядка n . Введем и понятие «локальной» производной $z'(x) = y'(t + x)$ (производной на шаге), которую в соответствии с соотношением

$$u'(t + x) = \exp(Ax) [Au(t) + a] \quad (6)$$

можно искать в виде:

$$y'(t + x) = E^*(A, x)(Ay + a), \quad E^*(A, 0) = I, \quad (7)$$

где $E^*(A, x)$, как и $E(A, x)$ в (5), является некоторым приближением

к $\exp(Ax)$. Потребовав по аналогии с (3), (6) совпадения векторов, задаваемых по правилам (5), (7), приходим к следующим связям в пределах шага сетки между порождающими рассматриваемый метод операторами:

$$E(A, x) = I + S^*(A, x)A, \quad S^*(A, x) = \int_0^x E^*(A, \xi) d\xi. \quad (8)$$

Очевидно, что кажущееся на первый взгляд естественным (см. (3), (4)) соотношение

$$S^*(A, \tau) = \int_0^\tau E(A, x) dx$$

совместимо с (8) лишь в тривиальном случае $E(A, x) = \exp(Ax)$.

С учетом (8) при условии коммутативности $AE^*(A, x) = E^*(A, x)A$, что при аппроксимации $\exp(Ax)$ не является обременительным ограничением, можно в дополнение к (7) получить равенство

$$Ay(t+x) + a = E(A, x)(Ay + a). \quad (9)$$

Это позволяет для невязки $\delta(t+x) = Ay(t+x) + a - y'(t+x)$ приближенного решения $y(t+x)$ на исходной системе (2) записать:

$$\delta(t+x) = [E(A, x) - E^*(A, x)](Ay + a). \quad (10)$$

Равенства (7), (9), (10) дают достаточно информативное представление о локальном процессе искажения с ростом τ исходной системы (2) на приближенном решении (4) при выполнении требований (8). Этим же по построению закладывается и правильное положение равновесия в разностную аппроксимацию исходной системы (см. [4]). Дальнейшее повышение уровня согласованности дифференциальной и разностной задач (скажем, в рамках требований из [2]) может быть связано с выбором оператора $E^*(A, x)$. Один из вариантов такого выбора, ориентированный на случай отрицательных собственных значений $\lambda_i (\lambda_n < \lambda_1)$, $i = 1, 2, \dots, n$, недефектной матрицы A , и будет рассмотрен ниже. Он базируется на процедуре выделения из матричной экспоненты спектральной составляющей с многочленной аппроксимацией оставшегося множителя:

$$\begin{aligned} E^*(A, x) &= E_m^*(A, x) = \\ &= \left[I + \frac{x}{1!} (A + \mu I) + \dots + \frac{x^m}{m!} (A + \mu I)^m \right] \exp(-\mu x), \quad \mu > 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Конкретное значение постоянной μ при этом может задаваться по-разному в зависимости от поставленной цели.

По построению (см. (11)) при любых фиксированных значениях μ и x

$$E_m^*(A, x) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \exp(Ax). \quad (12)$$

В соответствии с (8) по заданному (см. (11)) $E_m^*(A, x)$ строим

$$E_{m+1}(A, x) = I + S_m^*(A, x)A, \quad (13)$$

где

$$S_m^*(A, x) = \int_0^x E_m^*(A, \xi) d\xi. \quad (14)$$

Полученное при этом семейство методов (см. (4)) принимает вид:

$$\hat{y}^m = \hat{y} = y + S_m^*(A, \tau)(Ay + a). \quad (15)$$

Из (13), (14) с учетом (12) следует, что при любых фиксированных μ и x

$$S_m^*(A, x) \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \int_0^x \exp(A\xi) d\xi, \quad (16)$$

$$E_{m+1}(A, x) \rightarrow \exp(Ax), \quad (17)$$

когда $m \rightarrow \infty$, тем самым (см. (3), (4), (15)) и $\hat{y}^m \rightarrow u(t+x)$, если $y = u(t)$.

Локальные свойства типа (12), (16), (17) еще не гарантируют высокий уровень согласованности даже в качественном поведении решений дифференциальной и соответствующей разностной задач. Как отмечено в [3], одной из наиболее важных характеристик такой согласованности применительно к (2), (15) является уровень спектральной согласованности $E_{m+1}(A, x)$ и $\exp(Ax)$. Для облегчения анализа такой согласованности введем понятие спектральной функции $E(\lambda, x)$ оператора $E(A, x)$. Функция $E(\lambda, x)$ как скалярная функция двух переменных λ и x должна удовлетворять условиям

$$E(A, x)\xi^i = E(\lambda_i, x)\xi^i, \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

где ξ^i есть собственный вектор матрицы A , отвечающий собственному значению λ_i .

В рассматриваемом нами случае выбора (11) при любом фиксированном $x > 0$ и $\lambda \in [-\mu, 0]$ очевидны следующие утверждения:

$$0 < E_{m-1}^*(\lambda, x) \leq E_m^*(\lambda, x) \leq \exp(\lambda x), \quad m \geq 1, \quad (18)$$

$$\frac{\partial^i E_m^*(\lambda, x)}{\partial \lambda^i} = x^i E_{m-i}^*(\lambda, x), \quad i = 0, 1, \dots, m. \quad (19)$$

Из (18) следует монотонный характер процесса (12) на спектральном уровне. Равенства же (19) гарантируют положительность и монотонность спектральной функции $E_m^*(\lambda, x)$ и всех ее производных по $\lambda \in [-\mu, 0]$ при любом фиксированном $x > 0$, что является одной из наиболее важных характеристик уровня согласованности операторов $E_m^*(A, x)$ и $\exp(Ax)$.

С учетом (8), (18) для спектральной функции $E_{m+1}(\lambda, x)$ матрицы $E_{m+1}(A, x)$ можно записать (в прежних границах для λ и x):

$$\exp(\lambda x) \leq 1 + \lambda \int_0^x E_m^*(\lambda, \xi) d\xi = E_{m+1}(\lambda, x) \leq E_m(\lambda, x), \quad m \geq 0. \quad (20)$$

На основании (18), (20) можно констатировать монотонный и двусторонний характер приближения при $m \rightarrow \infty$ спектральной функции оператора $\exp(Ax)$ функциями $E_m^*(\lambda, x)$ и $E_{m+1}(\lambda, x)$. Исходя из (8), (19) непосредственными вычислениями можно проверить также, что функция $E_{m+1}(\lambda, x)$ и все ее производные по λ (при любом фиксированном $x > 0$) на концах отрезка $[-\mu, 0]$ принимают положительные значения, откуда на основании теоремы Бюдана — Фурье (см., напр., [5]) можно сделать вывод об их монотонности по λ на данном отрезке.

Приведенная выше информация относительно метода (15) обеспечивает (см. [2]) (скажем, при выборе $\mu = \|A\| \alpha$, $\alpha \geq 1$) высокий уровень согласованности в поведении решений исходной дифференциальной и соответствующей разностной задач, при этом заложенная конструктивно свобода в выборе величины шага τ и степени m многочлена (11) позволяет, например, с учетом (10) адаптировать, как и в [6], вычислительный алгоритм к численно наблюдаемой траектории. Значение параметра μ при необходимости также можно изменять вдоль разностной траектории.

Не останавливаясь здесь на детальной проработке подобных вычислительных алгоритмов, отметим лишь, что им можно придать рекурсивный характер, при этом вычислительный процесс нетрудно организовать так, что в отличие, скажем, от [4] он не будет связан с процедурой умножения квадратных матриц, а может базироваться, как и в [6], лишь на операции умножения матрицы на вектор, что особенно важно в случае задач большой размерности.

По построению оператор (13) лучше аппроксимирует $\exp(Ax)$ в «жесткой» части спектра матрицы A , чем в «мягкой». Для повышения качества подобной аппроксимации при малых по абсолютной величине λ_i по (13) сформируем новый оператор

$$\tilde{E}(A, x) = \tilde{E}_{m+2}(A, x) = I + S_{m+1}(A, x)A, \quad (21)$$

где

$$S_{m+1}(A, x) = \int_0^x E_{m+1}(A, \xi) d\xi. \quad (22)$$

При этом в дополнение к свойству аппроксимации $\tilde{E}_{m+2}(0, x) = 1$ для «мягкой» части спектра матрицы A будем иметь (см. (13), (14), (21), (22)):

$$\frac{\partial \tilde{E}_{m+2}(0, x)}{\partial x} = S_{m+1}(0, x) = \int_0^x E_{m+1}(0, \xi) d\xi = x. \quad (23)$$

Тем самым на основе (15) получаем семейство методов

$$\hat{y}^{m+1} = \hat{y} = y + S_{m+1}(A, \tau)(Ay + a), \quad (24)$$

характеризующихся улучшенными свойствами аппроксимации (см. (23)) спектральной функции $\exp(\lambda x)$ посредством $\tilde{E}_{m+2}(\lambda, x)$ при малых по абсолютной величине значениях λ . Монотонность по $\lambda \in [-\lambda_n, 0]$ функции $\tilde{E}_{m+2}(\lambda, x)$ при любом фиксированном $x > 0$ обеспечивается в этом случае выбором степени m многочлена (11).

На основе (24) с использованием процедуры типа (21), (22) рекурсивно можно строить методы с повышением порядка гладкости приближения при $\lambda = 0$ спектральной функции $\exp(\lambda x)$ посредством $\tilde{E}(\lambda, x)$.

1. Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Черноруцкий И. Г. Численные методы решения жестких систем. М., 1979.

2. Бобков В. В., Мандрик П. А., Репников В. И. // Дифференц. уравнения. 1993. Т. 29. № 4. С. 689.

3. Бобков В. В. // Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений: Сб. науч. тр. / Под ред. С. С. Филиппова. М., 1988. С. 96.

4. Бобков В. В. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1987. № 2. С. 72.

5. Иванов В. В. Методы вычислений на ЭВМ: Справоч. пособие. Киев, 1986. С. 474.

6. Бобков В. В., Бобкова Н. А. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1992. № 3. С. 60.

Поступила в редакцию 07.06.93.

УДК 517.925

ЧИНЬ ЗАНЬ ДАНГ (ВЬЕТНАМ)

О ЧАСТНОЙ ИЗОХРОННОСТИ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ СИСТЕМ КОШИ — РИМАНА

Necessary and sufficient coefficient conditions of a particular isochronism of the two-dimensional holomorphic autonomous systems of the ordinary differential equations satisfying Coshy — Reman's conditions are obtained.

Рассмотрим вещественную систему двух обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\dot{x} = a_1x - b_1y + \sum_{i+j=2}^{\infty} a_{ij}x^i y^j = P(x, y), \quad (1)$$

$$\dot{y} = b_1x + a_1y + \sum_{i+j=2}^{\infty} b_{ij}x^i y^j = Q(x, y)$$

в предположении, что $b_1 \neq 0$, точка $O(0, 0)$ является изолированной особой точкой для системы (1), а правые части последней — голоморфные в некоторой окрестности начала координат фазовой плоскости функции. Пусть система (1) имеет в точке $O(0, 0)$ центр или фокус и удовлетворяет условиям Коши — Римана:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \frac{\partial Q}{\partial y}, \quad \frac{\partial P}{\partial y} = -\frac{\partial Q}{\partial x}. \quad (2)$$

В [1] для системы (1) при условиях (2) указаны необходимые и

достаточные условия существования частной изохронности первого и второго порядков. Нами рассматривается вопрос о частной изохронности порядка выше двух для системы (1), когда последняя имеет вид:

$$\dot{x} = a_1 x - b_1 y + \sum_{k=1}^{\infty} P_{kn+1}(x, y) \equiv P(x, y),$$

$$\dot{y} = b_1 x + a_1 y + \sum_{k=1}^{\infty} Q_{kn+1}(x, y) \equiv Q(x, y), \quad (3)$$

где

$$P_{kn+1}(x, y) = \sum_{i+j=kn+1} a_{ij} x^i y^j, \quad Q_{kn+1}(x, y) = \sum_{i+j=kn+1} b_{ij} x^i y^j,$$

а n — целое положительное число. В этом случае, согласно [1], система (3), удовлетворяющая условиям (2), может быть записана в виде:

$$\dot{r} = a_1 r + \sum_{k=1}^{\infty} g_{kn+1}(\varphi) r^{kn+1}, \quad \dot{\varphi} = b_1 + \sum_{k=1}^{\infty} f_{kn+1}(\varphi) r^{kn}, \quad (4)$$

где

$$g_n(\varphi) = a_n \cos(n-1)\varphi - b_n \sin(n-1)\varphi, \quad f_n(\varphi) = a_n \sin(n-1)\varphi + b_n \cos(n-1)\varphi.$$

Для системы (4) все функции f_k, g_k равны нулю, кроме $f_1, g_1, f_{kn+1}, g_{kn+1}$, где $k=1, 2, 3, \dots$

Введем обозначения:

$$B_{kn} = B_{kn}^0 - \sum_{j=1}^{k-1} B_{kn}^{jn} / (a_1^2 + b_1^2), \quad (5)$$

$$A_{kn} = B_{kn}^0 - \sum_{j=1}^{k-1} A_{kn}^{jn} / (a_1^2 + b_1^2),$$

где

$$A_n \equiv A_n^0, \quad B_n \equiv B_n^0, \quad A_{kn}^0 = a_{kn+1} b_1 - b_{kn+1} a_1, \quad B_{kn}^0 = a_{kn+1} a_1 + b_{kn+1} b_1,$$

$$A_{kn}^{jn} = A_{jn} B_{kn-jn}^0 + B_{jn} A_{kn-jn}^0, \quad B_{kn}^{jn} = B_{jn} B_{kn-jn}^0 - A_{jn} A_{kn-jn}^0.$$

Теорема 1. Для того чтобы в случае фокуса для дифференциальной системы (3) (или (4)) имела место частная изохронность порядка n (как, оказывается, и порядка $2n$), необходимо и достаточно выполнение одной из следующих двух серий условий:

1. $B_{kn} = 0$ при k нечетных и $A_{kn} = 0$ при k четных (в этом случае $\varphi_0 = \pi/2n; 3\pi/2n$);

2. $B_n \neq 0$ и

$$A_{kn}^0 \sum_{j=0}^{[k/2]} (-1)^j C_k^{2j} B_n^{k-2j} A_n^{2j} = B_{kn}^0 \sum_{j=0}^{[k/2]} (-1)^j C_k^{2j+1} B_n^{k-2j-1} A_n^{2j+1}. \quad (6)$$

(В этом случае $\varphi_0 = \arctg(A_n^0/B_n^0)/n; [\arctg(A_n^0/B_n^0) + \pi]/n$.)

Д о к а з а т е л ь с т в о. Чтобы для системы (3) в случае фокуса имела место частная изохронность порядка n , необходимо и достаточно выполнение равенства

$$\omega_k(\varphi_0 + \frac{2\pi}{n}) = 0, \quad k = 1, 2, 3, \dots, \quad (7)$$

где предполагается $\omega_k(\varphi_0) = 0$ (см., напр., [2] § 11). Функции $\omega_k(\varphi)$ находятся из соотношений, получаемых дифференцированием по t обеих

частей равенства $t + \frac{1}{b_1}(\varphi_0 - \varphi) = \sum_{k=1}^{\infty} \omega_k r^k$ и приравниванием коэффициен-

тов при одинаковых степенях r . В результате последней операции приходим к следующим соотношениям:

$$\omega_1' + \frac{a_1}{b_1} \omega_1 = 0,$$

$$\omega_{n-1}' + \frac{(n-1)a_1}{b_1} \omega_{n-1} = 0, \quad (8)$$

$$\omega_n' + \frac{na_1}{b_1} \omega_n = -\frac{1}{b_1^2} f_{n+1},$$

$$\omega_{n+1}' + \frac{(n+1)a_1}{b_1} \omega_{n+1} = -\frac{1}{b_1} (\omega_1' f_{n+1} + \omega_1 g_{n+1})$$

Из системы (8) по начальному условию $\omega_k(\varphi_0) = 0$ находим, что $\omega_1(\varphi)$, $\omega_2(\varphi)$, ... $\omega_{n-1}(\varphi)$ равны нулю, а $\omega_n(\varphi)$ вычисляется по формуле

$$\omega_n(\varphi) = \frac{1}{nb_1(a_1^2 + b_1^2)} \{ [A_n^0 \cos n\varphi - B_n^0 \sin n\varphi] - [A_n^0 \cos n\varphi_0 - B_n^0 \sin n\varphi_0] \times \\ \times \exp \left[-\frac{na_1}{b_1} (\varphi - \varphi_0) \right] \},$$

где A_n^0 , B_n^0 определяются формулами (5).

Для функций $\omega_1(\varphi)$, $\omega_2(\varphi)$, ... $\omega_{n-1}(\varphi)$ условия изохронности (7) выполняются всегда, а для функции $\omega_n(\varphi)$ это условие эквивалентно

$$A_n^0 \cos n\varphi_0 - B_n^0 \sin n\varphi_0 = 0. \quad (9)$$

Учитывая, что ω_1 , ω_2 , ... ω_{n-1} равны нулю, замечаем, что и функции ω_{n+1} , ω_{n+2} , ... ω_{2n-1} равны нулю, а функция ω_{2n} находится из уравнения

$$\omega_{2n}' + \frac{2na_1}{b_1} \omega_{2n} = -\frac{1}{b_1^2} f_{2n+1} - \frac{1}{b_1} (\omega_n' f_{n+1} + n\omega_n g_{n+1}),$$

которое дает

$$\omega_{2n}(\varphi) = \frac{1}{2nb_1(a_1^2 + b_1^2)} \{ [A_{2n} \cos 2n\varphi - B_{2n} \sin 2n\varphi] - \\ - [A_{2n} \cos 2n\varphi_0 - B_{2n} \sin 2n\varphi_0] \exp \left[-\frac{2na_1}{b_1} (\varphi - \varphi_0) \right] \},$$

где A_{2n} , B_{2n} вычисляются по формулам (5). В данном случае условие изохронности (7) для $\omega_{2n}(\varphi)$ эквивалентно условию

$$A_{2n} \cos 2n\varphi_0 - B_{2n} \sin 2n\varphi_0 = 0. \quad (10)$$

Продолжая процесс нахождения функций $\omega_k(\varphi)$, мы получаем, что все $\omega_k(\varphi) = 0$, кроме ω_{kn} , определяются формулой

$$\omega_{kn}(\varphi) = \frac{1}{knb_1(a_1^2 + b_1^2)} \{ [A_{kn} \cos kn\varphi - B_{kn} \sin kn\varphi] - \\ - [A_{kn} \cos kn\varphi_0 - B_{kn} \sin kn\varphi_0] \exp \left[-\frac{kna_1}{b_1} (\varphi - \varphi_0) \right] \}, \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

где A_{kn} , B_{kn} находятся по формулам (5).

Условие изохронности (7) для $\omega_{kn}(\varphi)$ здесь эквивалентно условию

$$A_{kn} \cos kn\varphi_0 - B_{kn} \sin kn\varphi_0 = 0. \quad (11)$$

Равенство (11) играет для системы (3) ту же роль, какую играет равенство $A_k \cos k\varphi_0 - B_k \sin k\varphi_0 = 0$ для системы (3) в [1]. Таким образом, и коэффициенты A_n^0 , B_n^0 , A_{kn} , B_{kn} играют для системы (3) такую же роль, что и коэффициенты A_1^0 , B_1^0 , A_k , B_k для системы (3) в [1]. Справедливость доказываемой теоремы очевидна из [1].

В случае, когда $O(0, 0)$ является центром для системы (3), мы имеем аналогичную теорему (тогда в системе $a_1 = 0$).

Теорема 2. Для системы (3) всегда имеет место частная изохронность центра n -го порядка. Необходимое же и достаточное условия того, чтобы для системы (3) имела место частная изохронность центра порядка $2n$, состоит в выполнении одного из следующих условий:

1. $B_{kn} = b_{kn+1}b_1 - \sum_{j=1}^{k-1} B_{kj}^n / b_1^2 = 0$ при k нечетных (в этом случае $\varphi_0 = \pi/2n$; $3\pi/2n$);
2. $b_{kn+1} \neq 0$ и

$$a_{kn+1} \sum_{j=0}^{[k/2]} (-1)^j C_k^{2j} b_{n+1}^{k-2j} a_{n+1}^{2j} = b_{kn+1} \sum_{j=0}^{[k/2]} (-1)^j C_k^{2j+1} b_{n+1}^{k-2j-1} a_{n+1}^{2j+1}$$

при k нечетных (в этом случае

$$\varphi_0 = \arctg(A_n^0/B_n^0)/n; [\arctg(A_n^0/B_n^0) + \pi]/n).$$

Основываясь на свойствах коэффициентов A_{kn} , B_{kn} функций $\omega_{kn}(\varphi)$, можно доказать следующие теоремы.

Теорема 3. Для того чтобы для системы (3) в случае фокуса имела место частная изохронность n -го (а также $2n$ -го) порядка, достаточно, чтобы выполнялась одна из следующих двух серий условий:

- 1) $B_{kn}^0 = 0$ при k нечетных, а $A_{kn}^0 = 0$ при k четных; (в этом случае $\varphi_0 = \pi/2n$; $3\pi/2n$);

- 2) $A_{kn}^0 = 0$ при всех k (в этом случае $\varphi_0 = 0$; π/n).

Теорема 4. Для того чтобы в случае центра для системы (3) имела место частная изохронность порядка $2n$, достаточно, чтобы выполнялась одна из следующих двух серий условий:

- 1) $b_{kn+1} = 0$ при k нечетных, а $a_{kn+1} = 0$ при k четных (в этом случае $\varphi_0 = \pi/2n$; $3\pi/2n$);
- 2) $a_{kn+1} = 0$ при всех k (в этом случае $\varphi_0 = 0$; π/n).

1. Амеликин В. В., Чинь Зань Данг. Об изохронности системы Коши — Римана в случае фокуса // Весті АН БССР. Сер. фіз.-мат. наук. 1993. № 1. С. 28.

2. Амеликин В. В., Лукашевич Н. А., Садовский А. П. Нелинейные колебания в системах второго порядка. Мн., 1982.

Поступила в редакцию 24.09.93.

УДК 519.1

О. И. МЕЛЬНИКОВ, Г. А. КОРНЕЛЮК, Л. А. КЛИМОВА

РЕАЛИЗАЦИЯ ГИПЕРГРАФОВ ГРАФАМИ, ГОМЕОМОРФНЫМИ ЗВЕЗДЕ

The necessary and sufficient conditions of realizations of hypergraphs by graphs which are gomeomorphic to the star are under consideration now. The polinomial algorithm of the examination of these conditions is given.

Пусть задан гиперграф $H = (V, E)$. Реализацией гиперграфа H называется любой граф G , удовлетворяющий следующим условиям: 1) $VG = VH$; 2) любое ребро графа G содержится в некотором гиперребре гиперграфа H ; 3) для любого ребра $e \in E$ порожденный подграф $G(e)$ является связным.

Необходимость построения реализаций с различными свойствами появляется при решении целого ряда практических вопросов, в частности при автоматизации проектирования радиоэлектронной аппаратуры возникает задача построения планарных реализаций [1—3]. Но эта задача является NP-полной [4, 5]. В связи с этим возникает вопрос о выделении таких классов гиперграфов, для которых задача полиномиально разрешима. Наибольшее внимание исследователей привлекла возможность реализации гиперграфа деревом [6—8]. В [9] предложен алгоритм решения этой задачи, который имеет временную сложность $O(n^2m)$. Алгоритм реализации гиперграфа цепью временной сложности $O(n+m+1)$ рассмотрен в [10]. В этих алгоритмах $n = |V|$, $m = |E|$, $l = \sum_{e \in E} |e|$. Предложены [11] достаточные условия реализации гиперграфа планарным графом.

В настоящей статье рассматриваются необходимые и достаточные условия реализации гиперграфа графом, гомеоморфным звезде. Используемая автором терминология соответствует [12].

Введем следующие обозначения. Пусть v_0 — некоторая вершина гиперграфа H , $E(v_0)$ — множество гиперребер, содержащих вершину v_0 . Пусть $H(v_0) = H \setminus E(v_0)$, а $H_i(v_0)$, $i = 1, s$ — связные компоненты гиперграфа $H(v_0)$. Рассмотрим какую-нибудь связную компоненту $H_i(v_0) = (V_i(v_0), E_i(v_0))$. $E_i(v_0) = \{E_1^i(v_0), \dots, E_p^i(v_0)\}$ — множество гиперребер этой компоненты. Обозначим через $\bar{E}_j^i(v_0)$, $j = 1, p$ гиперребро, получающееся при пересечении гиперребра $E_j^i(v_0)$ с множеством вершин, принадлежащих множеству $E(v_0)$, а через $\bar{E}_i(v_0)$ — множество таких гиперребер. Пусть $V^1 = \{v_1^1, v_1^2, \dots, v_1^i\}$ — множество вершин гиперграфа $H_i(v_0)$, являющихся вершинами какого-либо ребра из $E(v_0)$. Введем новую вершину u_i и построим гиперграф

$$H_{ij}(v_0) = (V_{ij}, E_{ij}), \quad V_{ij} = V_i(v_0) \cup u_i, \quad E_{ij} = E_i(v_0) \cup \bar{E}_i(v_0) \cup \{v_1^j, u_i\}.$$

Теорема 1. Древовидный гиперграф H реализуется графом, гомеоморфным звезде, тогда и только тогда, когда существует такая вершина v_0 , что для каждого гиперграфа $H_i(v_0)$ ($i = 1, s$) найдется такая вершина v_1^i , что гиперграф $H_{ij}(v_0)$ реализуется цепью.

Доказательство. Необходимость очевидна.

Достаточность. Реализуем гиперграфы $H_{ij}(v_0)$ цепями. Так как степень вершины u_i в этих гиперграфах равна 1 и ребро, содержащее вершину u_i , имеет ровно две вершины, то эта вершина будет концевой вершиной цепи. Удалим ребро $u_i v_1^i$ из полученных цепей и соединим ребрами вершину v_0 с вершинами v_1^i . Если какие-либо вершины гиперграфа остались изолированными в построенном графе (это могут быть только вершины из $E(v_0)$), соединим их с вершиной v_0 . Из древовидности исходного гиперграфа следует, что полученный граф гомеоморфен звезде. Осталось показать, что каждое ребро гиперграфа реализовано связным графом. Для гиперребер, не содержащих v_0 , это следует из реализации таких ребер цепью. Пусть E — некоторое гиперребро, содержащее v_0 . Покажем, что любые две вершины этого гиперребра соединяет цепь, содержащая только вершины этого гиперребра.

Случай 1. Пусть $L = (a, \dots, w, \dots, b)$ — цепь, соединяющая вершины a и b , принадлежащие гиперребру E , вершина $w \notin E$ и $v_0 \notin L$.

Случай 1а. Вершины a и b не принадлежат никакому гиперребру, не входящему в $E(v_0)$. Из построения реализации следует, что существует такая последовательность гиперребер $E_1, E_2, \dots, E_p$, что $a \in E_1$, $b \in E_p$, $E_i \cap E_{i+1} \neq \emptyset$, $i = 1, p-1$, $a, b \in E$, т. е. исходный гиперграф не древовидный.

Случай 1б. Вершины a и b принадлежат некоторому гиперребру E_1 , не входящему в $E(v_0)$. В этом случае в граф $H_{ij}(v_0)$ входит гиперребро E_1 , получающееся при пересечении гиперребра E_1 с множеством вершин, принадлежащих множеству $E(v_0)$. Это гиперребро по условию реализуется цепью. Отсюда следует, что случай 1б невозможен.

Случай 2. Пусть $L = (a, \dots, v_0, v_1^j, \dots, w, \dots, b)$ — цепь, соединяющая вершины a и b , принадлежащие гиперребру E , а вершина $w \notin E$.

Случай 2а. $w = v_1^j$. Рассуждаем так же, как и в случае 1а.

Случай 2б. $w \neq v_1^j$. Если вершины w и b не принадлежат никакому гиперребру, не входящему в $E(v_0)$, то рассуждаем, как в случае 1а. Если же они принадлежат какому-либо гиперребру $E_1 \notin E(v_0)$, то рассуждаем, как в случае 1б.

Теорема доказана.

Оценим трудоемкость проверки условий теоремы 1. Проверка гиперграфа на древовидность требует $O(n^2 m)$ операций [9]. Гиперграфы $H_i(v_0)$ и множество $\bar{E}_i(v_0)$ можно построить за $O(nm)$, поэтому такую же трудоемкость имеет и процедура построения всех гиперграфов $H_{ij}(v_0) \setminus u_i$. Проверка возможности реализации всех таких гиперграфов цепями производится за $O(n + m + 1)$ [10], а так как гиперграф $H_{ij}(v_0)$ получается из $H_{ij}(v_0) \setminus u_i$ добавлением ребра $u_i v_1^i$, то проверка возможности реализации всех гиперграфов $H_{ij}(v_0)$ цепями требует $O(n(n + m + 1))$ операций.

Указанные построения необходимо проводить для любой вершины v_0 гиперграфа, поэтому общая трудоемкость проверки условий теоремы 1 будет $O(n^2(n+m+1))$.

Очевидна следующая

Теорема 2. Гиперграф H реализуется звездой тогда и только тогда, когда существует хотя бы одна вершина, инцидентная каждому гиперребру гиперграфа.

Работа выполнена при содействии Фонда фундаментальных исследований Республики Беларусь.

1. Баталов Б. В., Казенков Г. Г., Курнаев Ф. А., Щемилин В. М. Алгоритм взаимного размещения компонентов интегральных схем с минимальным числом внутрисхемных соединений. М., 1969. Вып. 3. С. 282.

2. Петренко А. И., Тетельбаум А. Я., Шранченко Б. Л. Автоматизация проектирования электронной аппаратуры (топологический подход). Киев, 1980. С. 170.

3. Van Cleemput W. M. Mathematical Models for the Circuits Layout Problem // IEEE Transaction on Circuits and Systems. 1976. V. CAS-23. № 12. P. 759.

4. Азаренок А. С., Сарванов В. И. О сложности планарной реализации гиперграфов // Вестн АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1987. № 4. С. 10.

5. Johnson D. S., Pollan H. O. Hypergraph Planarity and the Complexity of Drawing Venn Diagrams // Journ. Graph. Theory. 1987. V. 11. № 3. P. 309.

6. Gavril F. The Intersection Graphs of Subtrees in Trees are Exactly the Chordal Graphs // Journ. Combinatorial Theory. 1974. V. B. 16. Pt. 1.

7. Slater P. A. Characterization of SOFT Hypergraphs // Canad. Math. Bull. 1978. V. 21. № 3. P. 335.

8. Flament C. Hypergraphs Arbores // Diskete Mathematics. 1978. V. 21. № 3. P. 223.

9. Амбарян С. Л., Мовсесян А. А., Пилипосян Т. Э. О минимальных реализациях гиперграфов // Вопр. радиоэлектроники. Сер. ЭВТ. 1981. Вып. 16. С. 37.

10. Booth K. S., Lueker G. S. Testing for the Consecutive Ones Property, Interval Graphs and Graph Planarity Using PQ-Tree Algorithms // Journ. of Comp. and Syst. Sciences. 1976. V. 13. P. 335.

11. Левин А. Г., Мельников О. И. Ослабленное условие Хеллаи и планарность гиперграфа // Вестн АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. 1988. № 3. С. 12.

12. Емеличев В. А., Мельников О. И., Сарванов В. И., Тышкевич Р. И. Лекции по теории графов. М., 1990.

Поступила в редакцию 16.06.93.

УДК 519.233.2

Д. В. СИНЬКЕВИЧ, Н. Н. ТРУШ

ВЫЧИСЛЕНИЕ МОМЕНТОВ ВЫСШИХ ПОРЯДКОВ АГРЕГИРОВАННЫХ ЧАСТОТ СОСТОЯНИЙ ОДНОРОДНОЙ МАРКОВСКОЙ ЦЕПИ ДЛЯ ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ СХЕМЫ

The formulae for calculation of mathematical expectation of arbitrary number product of homogeneous Markovian chain state frequency is obtained taken in the same time moments under condition that each multiply degree is some natural number.

Пусть в каждый из T моментов времени имеются система из $N = N(t)$, $t = 1, \overline{T}$, микрообъектов, распределенных по r состояниям, и наблюдения $p_{j,t}$, $j = 1, \overline{r}$, $t = 1, \overline{T}$, являющиеся абсолютными частотами попадания микрообъектов в j -е состояние в момент времени t . Математической моделью эволюции каждого из N микрообъектов служит однородная, конечного числа состояний марковская цепь с одной и той же матрицей $P = (P_{ij})$, $i, j = 1, \overline{r}$, переходных вероятностей, причем все N марковские цепи независимы.

Пусть $q_{j,t}$, $j = 1, \overline{r}$, $t = 1, \overline{T}$, обозначает безусловную вероятность попадания микрообъекта в j -е состояние в момент времени t . Эта вероятность постоянна для каждого отдельного микрообъекта в данный момент времени и меняется с изменением t .

В работе [1] предложено рассматривать описанную вероятностную модель как полиномиальное распределение, и на этой основе построена оценка максимального правдоподобия $\hat{p}$ матрицы p . Для исследования асимптотических свойств оценки $\hat{p}$ в работе [2] получены достаточно общие формулы вычисления моментов высших порядков случайных

величин $p_{j,t}$, $j = \overline{1, r}$, $t = \overline{1, T}$. В статье даются обобщения результатов [2]. Предварительно докажем вспомогательную лемму.

Лемма 1. Для любых натуральных чисел m , k имеет место соотношение

$$m^k = \sum_{i=1}^{k+1} \frac{1}{(i-1)!} (m-1)_{i-1} \sum_{j=0}^{i-1} (-1)^j C_{i-1}^j (i-j)^k,$$

где

$$(m-1)_{(i-1)} = \begin{cases} (m-1)(m-2) \dots (m-1-(i-2)) = \frac{(m-1)!}{(m-i)!}, & i \leq m; \\ 0, & i > m. \end{cases}$$

Доказательство. Его проведем методом математической индукции по k .

1. Для $k=1$ имеем верное равенство. Действительно,

$$\sum_{i=1}^2 \frac{1}{(i-1)!} (m-1)_{(i-1)} \sum_{j=0}^{i-1} (-1)^j C_{i-1}^j (i-j) = 1 + (m-1) = m.$$

2. Предположим верность утверждения для $k=s-1$, т. е.

$$\begin{aligned} m^{s-1} &= 1 + \frac{1}{1!} (2^{s-1} - 1) (m-1) + \frac{1}{2!} (3^{s-1} - 2 \cdot 2^{s-1} + 1) (m-1)_2 + \\ &\quad + \frac{1}{3!} (4^{s-1} - 3 \cdot 3^{s-1} + 3 \cdot 2^{s-1} - 1) (m-1)_3 + \dots + \\ &+ \frac{1}{(s-1)!} (C_{s-1}^0 s^{s-1} - C_{s-1}^1 (s-1)^{s-1} + \dots + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1}) (m-1)_{(s-1)}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь целесообразно отметить, что

$$\begin{aligned} C_{s-1}^0 s^{s-1} - C_{s-1}^1 (s-1)^{s-1} + C_{s-1}^2 (s-2)^{s-1} + \dots + \\ + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1} = (s-1)! \end{aligned} \quad (2)$$

Этот результат можно найти в [3] или непосредственно доказать, также используя метод математической индукции.

3. Докажем верность утверждения леммы 1 для $k=s$. Используя равенство (1), будем иметь:

$$\begin{aligned} m^s &= m \cdot m^{s-1} = (m-1+1) + \frac{1}{1!} (2^{s-1} - 1) (m-1) (m-2+2) + \\ &\quad + \frac{1}{2!} (3^{s-1} - 2 \cdot 2^{s-1} + 1) (m-1) (m-2) (m-3+3) + \dots + \\ &\quad + \frac{1}{(s-2)!} (C_{s-2}^0 (s-1)^{s-1} - C_{s-2}^1 (s-2)^{s-1} + \dots + (-1)^{s-2} C_{s-2}^{s-2}) \times \\ &\quad \times (m-1) \dots (m-s+2) (m-(s-1) + (s-1)) + \frac{1}{(s-1)!} \times \\ &\quad \times (C_{s-1}^0 s^{s-1} - C_{s-1}^1 (s-1)^{s-1} + C_{s-2}^2 (s-2)^{s-1} + \dots + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1}) \times \\ &\quad \times (m-1) \dots (m-s+1) (m-s+s). \end{aligned} \quad (3)$$

Производя несложную группировку слагаемых в правой части (3) и учитывая, что

$$(C_l^i (l+1) - (l+2) C_{l+1}^{i+1}) (l-i+1)^n = -C_{l+1}^{i+1} (l-i+1)^{n+1},$$

где l, i, n — произвольные натуральные числа, $l \geq i$, получим:

$$\begin{aligned} m^s &= 1 + \frac{1}{1!} (2^s - 1) (m-1) + \frac{1}{2!} (3^s - 2 \cdot 2^s + 1) (m-1)_2 + \\ &\quad + \frac{1}{3!} (4^s - 3 \cdot 3^s + 3 \cdot 2^s - 1) (m-1)_3 + \dots + \frac{1}{(s-1)!} \times \\ &\quad \times (C_{s-1}^0 s^s - C_{s-1}^1 (s-1)^s + C_{s-1}^2 (s-2)^s + \dots + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1}) \times \end{aligned}$$

$$\times (m-1)_{(s-1)} + \frac{1}{(s-1)!} (C_{s-1}^0 s^{s-1} - C_{s-1}^1 (s-1)^{s-1} + C_{s-1}^2 (s-2)^{s-1} + \dots + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1}) (m-1)_s. \quad (4)$$

На основании соотношения (2) имеем:

$$\frac{1}{(s-1)!} (C_{s-1}^0 s^{s-1} - C_{s-1}^1 (s-1)^{s-1} + C_{s-1}^2 (s-2)^{s-1} + \dots + (-1)^{s-1} C_{s-1}^{s-1}) = \\ = \frac{1}{s!} (C_s^0 (s+1)^s - C_s^1 s^s + C_s^2 (s-1)^s + \dots + (-1)^s C_s^s).$$

Подставляя последний результат в правую часть соотношения (4), получим утверждение леммы 1. Лемма 1 доказана. Используя полученный результат, докажем теорему.

Теорема 1. Для любых $i = \overline{1, r}$, $t = \overline{1, T}$, натурального k имеет место равенство:

$$E(n_{i,t}^k) = \sum_{s=1}^{\min(k, N)} (N)_s \frac{1}{(s-1)!} q_{i,t}^s \sum_{v=0}^{s-1} (-1)^v C_{s-1}^v (s-v)^{k-1}.$$

Доказательство. В предположениях полиномиальной схемы имеем:

$$E(n_{i,t}^k) = \sum_{n_{i,t} > 0} n_{i,t}^k \frac{N!}{n_{i,t}! (N - n_{i,t})!} q_{i,t}^{n_{i,t}} (1 - q_{i,t})^{N - n_{i,t}}, \quad i = \overline{1, r}, \quad t = \overline{1, T}.$$

Откуда следует другое равносильное соотношение

$$E(n_{i,t}^k) = \sum_{n_{i,t} \geq 1} n_{i,t}^{k-1} \frac{N!}{(n_{i,t} - 1)! (N - n_{i,t})!} q_{i,t}^{n_{i,t}} (1 - q_{i,t})^{N - n_{i,t}}, \\ i = \overline{1, r}, \quad t = \overline{1, T}.$$

Для дальнейшего преобразования правой части последнего равенства, воспользовавшись леммой 1, получим:

$$E(n_{i,t}^k) = N q_{i,t} \sum_{n_{i,t} \geq 1} \frac{(N-1)!}{(n_{i,t} - 1)! (N - n_{i,t})!} q_{i,t}^{n_{i,t}-1} (1 - q_{i,t})^{N - n_{i,t}} \times \\ \times \sum_{s=1}^k \sum_{v=0}^{s-1} (-1)^v C_{s-1}^v (s-v)^{k-1} \frac{1}{(s-1)!} (n_{i,t} - 1)_{s-1}, \quad i = \overline{1, r}, \quad t = \overline{1, T}. \quad (5)$$

Перегруппировав слагаемые в правой части соотношения (5), будем иметь:

$$E(n_{i,t}^k) = \sum_{s=1}^k \sum_{v=0}^{s-1} (N)_s q_{i,t}^s \frac{(-1)^v C_{s-1}^v (s-v)^{k-1}}{(s-1)!} \times \\ \times \sum_{n_{i,t} \geq s} \frac{(N-s)!}{(n_{i,t} - s)! (N - s - (n_{i,t} - s))!} q_{i,t}^{n_{i,t}-s} (1 - q_{i,t})^{(N-s) - (n_{i,t} - s)} = \\ = \sum_{s=1}^k \sum_{v=0}^{s-1} (N)_s q_{i,t}^s \frac{(-1)^v C_{s-1}^v (s-v)^{k-1}}{(s-1)!} (q_{i,t} + 1 - q_{i,t})^{N-s} = \\ = \sum_{s=1}^k \sum_{v=0}^{s-1} (N)_s q_{i,t}^s \frac{(-1)^v C_{s-1}^v (s-v)^{k-1}}{(s-1)!}, \quad i = \overline{1, r}, \quad t = \overline{1, T}.$$

Причем при $k > N$ имеем, что $(N)_s = 0$ для всех s из интервала $(N, k]$. Теорема 1 доказана.

На основании этой теоремы докажем верность более общего утверждения.

Пусть $j = j(1, 2, \dots, r)$ — произвольная перестановка индексов $(1, 2, \dots, r)$; $j(i), i = \overline{1, 1}$ — l первых членов этой перестановки, $l = \overline{1, r}$; $k(i), i = \overline{1, 1}$ — l произвольных натуральных чисел. Тогда справедливо утверждение.

Теорема 2. Для любых $t = \overline{1, T}$; $j(i), i = \overline{1, 1}$; $k(i), i = \overline{1, 1}$, $l \leq r$ имеет место равенство:

$$E \left(\prod_{i=1}^l n_{j(i),t}^{k(i)} \right) = \sum_{s(i)=1}^{k(i)} \sum_{v(i)=0}^{s(i)-1} \left(\prod_{i=1}^l (-1)^{v(i)} \times \right. \\ \left. \times C_{s(i)-1}^{v(i)} (s(i) - v(i))^{k(i)-1} \frac{1}{(s(i)-1)!} q_{j(i),t}^{s(i)} \right) (N) \sum_{i=1}^l s(i).$$

Доказательство. По определению математического ожидания имеем в предположениях полиномиальной схемы, что

$$E \left(\prod_{i=1}^l n_{j(i),t}^{k(i)} \right) = \sum_{\substack{n_{j(i),t} > 0 \\ i = \overline{1, l}}} \left(\prod_{i=1}^l n_{j(i),t}^{k(i)} \right) \frac{N!}{\left(\prod_{i=1}^l n_{j(i),t}! \right) \left(N - \sum_{i=1}^l n_{j(i),t} \right)!} \times \\ \times \left(\prod_{i=1}^l q_{j(i),t}^{n_{j(i),t}} \right) \left(1 - \sum_{i=1}^l q_{j(i),t} \right)^{N - \sum_{i=1}^l n_{j(i),t}}, \quad t = \overline{1, T}.$$

Откуда следует другое равносильное соотношение:

$$E \left(\prod_{i=1}^l n_{j(i),t}^{k(i)} \right) = \sum_{\substack{n_{j(i),t} > 0 \\ t = \overline{1, T}}} \left(\prod_{i=2}^l n_{j(i),t}^{k(i)} \right) \frac{N!}{\left(\prod_{i=2}^l n_{j(i),t}! \right) \left(N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} \right)!} \times \\ \times \left(\prod_{i=2}^l q_{j(i),t}^{n_{j(i),t}} \right) \left[\sum_{n_{j(1),t} > 0} n_{j(1),t}^{k(1)} \frac{1}{n_{j(1),t}! \left(\left(N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} \right) - n_{j(1),t} \right)!} \times \right. \\ \left. \times q_{j(1),t}^{n_{j(1),t}} \left(\left(1 - \sum_{i=2}^l q_{j(i),t} \right) - q_{j(1),t} \right)^{N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} - n_{j(1),t}} \right], \quad t = \overline{1, T}. \quad (6)$$

Для дальнейшего преобразования выражения, стоящего в квадратных скобках в правой части (6), применим теорему 1 с соответствующей заменой N на $\left(N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} \right)$. Получим

$$\sum_{n_{j(1),t} > 0} n_{j(1),t}^{k(1)} \frac{\left(N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} \right)!}{n_{j(1),t}! \left(\left(N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} \right) - n_{j(1),t} \right)!} q_{j(1),t}^{n_{j(1),t}} \times \\ \times \left(\left(1 - \sum_{i=2}^l q_{j(i),t} \right) - q_{j(1),t} \right)^{N - \sum_{i=2}^l n_{j(i),t} - n_{j(1),t}} = \\ = \sum_{s(1)=1}^{k(1)} \sum_{v(1)=0}^{s(1)-1} \frac{(-1)^{v(1)} C_{s(1)-1}^{v(1)} (s(1) - v(1))^{k(1)-1}}{(s(1)-1)!} q_{j(1),t}^{s(1)} \times$$

$$\times \left(1 - \sum_{i=2}^1 q_{j(i),t} \right)^{N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} - s(1)} \left(N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)_{s(1)}. \quad (7)$$

Подставляя правую часть соотношения (7) в (6), получим

$$\begin{aligned} E \left(\prod_{i=1}^k n_{j(i),t}^{k(i)} \right) &= \sum_{s(1)=1}^{k(1)} \sum_{v(1)=0}^{s(1)-1} (-1)^{v(1)} \times \\ &\times C_{s(1)-1}^{v(1)} (s(1) - v(1))^{k(1)-1} \frac{1}{(s(1)-1)!} q_{j(1),t}^{s(1)} \times \\ &\times \sum_{\substack{n_{j(i),t} \geq 0 \\ i=2,1}} \left(\prod_{i=2}^1 n_{j(i),t}^{k(i)} \right) \frac{N!}{\left(\prod_{i=2}^1 n_{j(i),t}! \right) \left(N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)!} \left(N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)_{s(1)} \times \\ &\times \left(\prod_{i=2}^1 q_{j(i),t}^{n_{j(i),t}} \right) \left(1 - \sum_{i=2}^1 q_{j(i),t} \right)^{N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} - s(1)}, \quad t = \overline{1, T}. \end{aligned} \quad (8)$$

Так как

$$\frac{\left(N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)_{s(1)}}{\left(N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)!} = \frac{1}{\left(N - s(1) - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)!},$$

то соотношение (8) равносильно следующему:

$$\begin{aligned} E \left(\prod_{i=1}^k n_{j(i),t}^{k(i)} \right) &= \sum_{s(1)=1}^{k(1)} \sum_{v(1)=0}^{s(1)-1} (-1)^{v(1)} \times \\ &\times C_{s(1)-1}^{v(1)} (s(1) - v(1))^{k(1)-1} \frac{1}{(s(1)-1)!} q_{j(1),t}^{s(1)} \times \\ &\times (N)_{s(1)} \left[\sum_{\substack{n_{j(i),t} \geq 0 \\ i=2,1}} \left(\prod_{i=2}^1 n_{j(i),t}^{k(i)} \right) \frac{(N - s(1))!}{\left(\prod_{i=2}^1 n_{j(i),t}! \right) \left(N - s(1) - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} \right)!} \times \right. \\ &\times \left. \left(\prod_{i=2}^1 q_{j(i),t}^{n_{j(i),t}} \right) \left(1 - \sum_{i=2}^1 q_{j(i),t} \right)^{N - \sum_{i=2}^1 n_{j(i),t} - s(1)} \right], \quad t = \overline{1, T}. \end{aligned} \quad (9)$$

Для дальнейшего преобразования выражения, стоящего в квадратных скобках в правой части (9), выполним действия, аналогичные (6) — (8). Получим

$$\begin{aligned} E \left(\prod_{i=1}^k n_{j(i),t}^{k(i)} \right) &= \sum_{s(1)=1}^{k(1)} \sum_{v(1)=0}^{s(1)-1} \sum_{s(2)=1}^{k(2)} \sum_{v(2)=0}^{s(2)-1} (-1)^{v(1)} \times \\ &\times C_{s(1)-1}^{v(1)} (s(1) - v(1))^{k(1)-1} \frac{1}{(s(1)-1)!} q_{j(1),t}^{s(1)} (N)_{s(1)} \times \\ &\times (-1)^{v(2)} C_{s(2)-1}^{v(2)} (s(2) - v(2))^{k(2)-1} \frac{1}{(s(2)-1)!} q_{j(2),t}^{s(2)} (N - s(1))_{s(2)} \times \end{aligned}$$

$$\times \left[\sum_{\substack{n_j(i), t > 0 \\ i=3, 1}} \left(\prod_{i=3}^1 n_j^{k(i)}(i), t \right) \frac{(N - s(1) - s(2))!}{\left(\prod_{i=3}^1 n_j(i), t! \right) \left(N - s(1) - s(2) - \sum_{i=3}^1 n_j(i), t \right)!} \times \right. \\ \left. \times \left(\prod_{i=3}^1 q_j^{n_j(i), t}(i), t \right) \left(1 - \sum_{i=3}^1 q_j(i), t \right)^{N - s(1) - s(2) - \sum_{i=3}^1 n_j(i), t} \right], \quad t = \overline{1, T}. \quad (10)$$

Так как $(N)_{s(1)}(N - s(1))_{s(2)} = (N)_{s(1) + s(2)}$, то последнее соотношение равносильно следующему:

$$E \left(\prod_{i=1}^1 n_j^{k(i)}(i), t \right) = \sum_{\substack{s(i)=1 \\ i=1, 2}}^{k(i)} \sum_{\substack{s(i)=1 \\ v(i)=0 \\ i=1, 2}}^{s(i)-1} \left(\prod_{i=1}^2 (-1)^{v(i)} \times \right. \\ \times C_{s(i)-1}^{v(i)} (s(i) - v(i))^{k(i)-1} \frac{1}{(s(i)-1)!} q_j^{s(i)}(i), t (N) \sum_{i=1}^2 s(i) \times \\ \times \left[\sum_{n_j(i), t > 0} \left(\prod_{i=3}^1 n_j^{k(i)}(i), t \right) \frac{(N - s(1) - s(2))!}{\left(\prod_{i=3}^1 n_j(i), t! \right) \left(N - s(1) - s(2) - \sum_{i=3}^1 n_j(i), t \right)!} \times \right. \\ \left. \times \left(\prod_{i=3}^1 q_j^{n_j(i), t}(i), t \right) \left(1 - \sum_{i=3}^1 q_j(i), t \right)^{N - s(1) - s(2) - \sum_{i=3}^1 n_j(i), t} \right], \quad t = \overline{1, T}. \quad (11)$$

Повторяя действия, аналогичные (6)–(11), еще (1–2) раза, получим

$$E \left(\prod_{i=1}^1 n_j^{k(i)}(i), t \right) = \sum_{\substack{s(i)=1 \\ i=1, 1}}^{k(i)} \sum_{\substack{s(i)=1 \\ v(i)=0 \\ i=1, 1}}^{s(i)-1} \left(\prod_{i=1}^1 (-1)^{v(i)} \times \right. \\ \times C_{s(i)-1}^{v(i)} (s(i) - v(i))^{k(i)-1} \frac{1}{(s(i)-1)!} q_j^{s(i)}(i), t (N) \sum_{i=1}^1 s(i) \times \\ \times \sum_{n_j(i), t > s(1)} \frac{(N - \sum_{i=1}^1 s(i))}{(n_j(k), t - s(1))! \left(N - \sum_{i=1}^1 s(i) - (n_j(1), t - s(1)) \right)!} q_j^{n_j(i), t - s(1)}(i), t \times \\ \times (1 - q_j(1), t)^{(N - \sum_{i=1}^1 s(i)) - (n_j(1), t - s(1))} = \\ = \sum_{\substack{s(i)=1 \\ i=1, 1}}^{k(i)} \sum_{\substack{s(i)=1 \\ v(i)=0 \\ i=1, 1}}^{s(i)-1} \left(\prod_{i=1}^1 (-1)^{v(i)} \times \right. \\ \times C_{s(i)-1}^{v(i)} (s(i) - v(i))^{k(i)-1} \frac{1}{(s(i)-1)!} q_j^{s(i)}(i), t \times \\ \times (N) \sum_{i=1}^1 s(i) (q_j(1), t + 1 - q_j(1), t)^{N - \sum_{i=1}^1 s(i)}, \quad t = \overline{1, T}.$$

Откуда непосредственно следует утверждение теоремы 2. Теорема 2 доказана. Здесь также отметим, что при $\sum_{i=1}^1 s(i) > N$ имеет место равенство:

$$(N) \sum_{i=1}^1 s_{(i)} = 0.$$

1. Ли Ц., Джадж Д., Зельнер А. Оценивание параметров марковских моделей по агрегированным временным рядам. М., 1977.

2. Синькевич Д. В., Труш Н. Н. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1992. № 2.

3. Феллер Ф. Введение в теорию вероятностей и ее приложения. М., 1984.

Поступила в редакцию 11.01.93.

УДК 517.929

ГАО СЮЭДУН (КНР)

РЕШЕНИЕ ДВУХ КУСОЧНО-ЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

Necessary and sufficient conditions of optimality of a support control are proved for optimal control problems with piecewise linear output and piecewise linear cost function.

1. Рассмотрим задачу оптимального управления:

$$J(u) = c'x(t^*) \rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0,$$

$$Hx(t^*) = g, \quad d'x(t^*) \geq \alpha_0 (\leq \alpha_0), \quad |u(t)| \leq 1, \quad t \in T = [0, t^*], \quad (1)$$

$$(x \in R^n, u \in R, A \in R^{n \times n}, b, c, d \in R^n, H \in R^{m \times n}, g \in R^m, \alpha_0 \in R, m < n).$$

Допустимое и оптимальное управления определяются стандартно [1. С. 11].

Пусть $u(t)$, $t \in T$, — допустимое управление задачи (1). Исследуем случай, когда допустимая траектория $x(t)$, $t \in T$, попадает на плоскость $d'x = \alpha_0$ в конечный момент t^* .

Обозначим: $F(t, \tau)$, $\tau \in [0, t]$, — фундаментальная матрица решений уравнения $\dot{x} = Ax$; $\bar{H}' = (H', d)$, $\bar{H}(t) = \bar{H}'F(t^*, t)b$, $c(t) = c'F(t^*, t)b$, $t \in T$.

Пусть $T_{\text{оп}} = \{t_1, t_2, \dots, t_m, t_{m+1}\} \subset T$ — совокупность из $m+1$ изолированного момента.

Определение 1. Множество $T_{\text{оп}}$ — опора задачи (1), если невырождена матрица $P = (\bar{H}(t), t \in T_{\text{оп}})$; 2. Пара $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ из допустимого управления $u(t)$, $t \in T$, и опоры $T_{\text{оп}}$ — опорное управление; 3. Опорное управление $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ — невырожденное, если $|(u(t+0) + u(t-0))/2| < 1$, $t \in T_{\text{оп}}$.

Подсчитаем вектор потенциалов $v' = (v, v_{m+1})' = c'_{\text{оп}} P^{-1} = (c(t), t \in T_{\text{оп}})' P^{-1}$, и коуправление $\Delta(t) = (v'H - c')F(t^*, t)b$, $t \in T$.

Теорема 1. Для оптимальности опорного управления $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ задачи (1) достаточно, а в случае его невырожденности и необходимо, чтобы выполнялись соотношения:

$$1) \Delta(t) \leq 0 \text{ при } u(t) = 1; \Delta(t) \geq 0 \text{ при } u(t) = -1;$$

$$\Delta(t) = 0 \text{ при } -1 < u(t) < 1, t \in T. \quad (2)$$

$$2) v_{m+1} \leq 0 (v_{m+1} \geq 0, \text{ если } d'x(t^*) \leq \alpha_0). \quad (3)$$

Доказательство. Необходимость. Пусть $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ — опорное невырожденное оптимальное управление задачи (1). Доказательство соотношений (2) аналогично [1. С. 56].

Докажем неравенство (3). Предположим, что оно неверно, т. е. $v_{m+1} > 0$. Построим промежутки $T_j^* = [0, \varepsilon]$, если $t_j = 0$; $T_j^* = [t^* - \varepsilon, t^*]$, если $t_j = t^*$; $T_j^* = [t_j - \varepsilon/2, t_j + \varepsilon/2]$, если $0 < t_j < t^*$, $t_j \in T_{\text{оп}}$. Наряду с $u(t)$, $t \in T$, рассмотрим зависящее от параметра $\varepsilon > 0$ семейство функций $\bar{u}(t) = u(t_j) + v_j$, $t \in T_j^*$, $t_j \in T_{\text{оп}}$; $\bar{u}(t) = u(t)$, $t \in T \setminus \bigcup_{j=1}^{m+1} T_j^*$.

Исследуем уравнение

$$\bar{H}\Delta x(t^*) = \int_0^{t^*} \bar{H}(t)\Delta u(t)dt = (0, \dots, 0, \epsilon\alpha), \alpha \geq 0. \quad (4)$$

Обозначим $v_{оп} = (v_j, j = \overline{1, m+1})$. Тогда уравнение (4) примет вид: $\epsilon P v_{оп} + 0(\epsilon) = (0, \dots, 0, \epsilon\alpha)$. Оно в силу невырожденности матрицы P и теоремы о неявной функции при достаточно малых $\epsilon > 0, \alpha > 0$ имеет единственное решение

$$v_{оп} = P^{-1}(0, \dots, 0, \alpha) + 0(\epsilon)/\epsilon. \quad (5)$$

Согласно (4), построенная выше функция $\bar{u}(t), t \in T$, — допустимое управление задачи (1).

Приращение критерия качества на $\bar{u}(t), u(t), t \in T$, равно:

$$\Delta J(u) = c'\Delta x(t^*) = \int_0^{t^*} c(t)\Delta u(t)dt = \epsilon c'_{оп} v_{оп} + 0(\epsilon). \quad (6)$$

Подставив (5) в (6), получим $\Delta J(u) = \epsilon c'_{оп} P^{-1}(0, \dots, 0, \alpha) + 0(\epsilon) = \epsilon v_{m+1} \alpha + 0(\epsilon)$. Это число при $v_{m+1} > 0$ и достаточно малых $\epsilon > 0, \alpha > 0$ отрицательно, что противоречит оптимальности управления $u(t), t \in T$. Неравенство (3) доказано.

Достаточность. Пусть $\bar{u}(t) = u(t) + \Delta u(t), t \in T$, — любое допустимое управление задачи (1). Из формулы Коши [1] получим

$$\bar{H}\Delta x(t^*) = \int_0^{t^*} \bar{H}(t)\Delta u(t)dt = (0, \dots, 0, \alpha), \alpha \geq 0. \quad (7)$$

Аналогично для критерия качества

$$\Delta J(u) = c'\Delta x(t^*) = \int_0^{t^*} C(t)\Delta u(t)dt. \quad (8)$$

Вычтя $v' \times (7)$ из (8), получим формулу приращения критерия качества $\Delta J(u) = \int_0^{t^*} -\Delta(t)\Delta u(t)dt + v_{m+1}\alpha$.

Из соотношений (2) и (3) следует неравенство $\Delta J(u) \leq 0$, которое означает, что $u(t), t \in T$, — оптимальное управление задачи (1). Теорема 1 доказана.

2. Применим полученный в п. 1 результат к задаче оптимального управления с кусочно-линейным выходом:

$$J(u) = c'x(t^*) \rightarrow \max, \dot{x} = Ax + bu, x(0) = x_0, \\ Hx(t^*) + hf(d'x(t^*)) = g, |u(t)| \leq 1, t \in T. \quad (9)$$

Здесь непрерывная скалярная функция $f(\alpha), \alpha \in R$, кусочно-линейна: $f(\alpha) = f^+\alpha + v^+, \alpha \geq \alpha_0; f(\alpha) = f^-\alpha + v^-, \alpha \leq \alpha_0, f^+, f^-, v^+, v^-, \alpha_0$ — заданные числа, $f^+\alpha_0 + v^+ = f^-\alpha_0 + v^-$.

Исследуем оптимальность допустимого управления $u(t), t \in T$, которому соответствует траектория $x(t), t \in T$, в конечный момент t^* попадающая на плоскость $d'x = \alpha_0$.

Опора и опорное управление для задачи (9) определяются, как и для (1) в п. 1. По опоре $T_{оп}$ задачи (9) подсчитаем вектор потенциалов $v' = (v, v_{m+1})' = c'_{оп} P^{-1}$ и коуправление $\Delta(t) = (v'\bar{H} - c')F(t^*, t)b, t \in T$.

С учетом терминального условия $Hx(t^*) + hf(d'x(t^*)) = g$ очевидно, что задача (9) эквивалентна следующим задачам:

$$c'x(t^*) \rightarrow \max, \dot{x} = Ax + bu, x(0) = x_0, \\ H^+x(t^*) = g^+, d'x(t^*) \geq \alpha_0, |u(t)| \leq 1, t \in T; \quad (10)$$

$$c'x(t^*) \rightarrow \max, \dot{x} = Ax + bu, x(0) = x_0, \\ H^-x(t^*) = g^-, d'x(t^*) \leq \alpha_0, |u(t)| \leq 1, t \in T, \quad (11)$$

где $H^+ = H + f^+hd'$, $H^- = H + f^-hd'$, $g^+ = g - v^+h$, $g^- = g - v^-h$.

В силу специальной структуры матриц H^+ , H^- можно доказать, что если $T_{\text{оп}}$ — опора задачи (9), то $T_{\text{оп}}$ — также опора задач (10), (11). При опоре $T_{\text{оп}}$ коуправления $\Delta^+(t)$, $\Delta^-(t)$, $t \in T$, для задач (10), (11) совпадают друг с другом и равны $\Delta(t)$, $t \in T$. Векторы потенциалов v^+ , v^- задач (10), (11) равны: $v^+ = (v^+, v_{m+1}^+) = (v, v_{m+1} - f^+ v' h)$, $v^- = (v^-, v_{m+1}^-) = (v, v_{m+1} - f^- v' h)$.

Тогда с учетом теоремы 1 нетрудно убедиться, что справедлива

Теорема 2. Для оптимальности опорного управления $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ задачи (9) достаточно, а в случае его невырожденности и необходимо, чтобы выполнялись соотношения:

1) $\Delta(t) \leq 0$ при $u(t) = 1$; $\Delta(t) \geq 0$ при $u(t) = -1$; $\Delta(t) = 0$ при $-1 < u(t) < 1$, $t \in T$.

2) $f^- v' h \leq v_{m+1} \leq f^+ v' h$.

3. Исследуем задачу оптимального управления с кусочно-линейным критерием качества:

$$J(u) = c'x(t^*) + f(d'x(t^*)) \rightarrow \max,$$

$$\dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0, \quad Hx(t^*) = g, \quad |u(t)| \leq 1, \quad t \in T, \quad (12)$$

где непрерывная скалярная функция $f(\alpha)$, $\alpha \in R$, определяется, как в п. 2.

Пусть $u(t)$, $t \in T$, — допустимое управление задачи (12), которому соответствует траектория $x(t)$, $t \in T$, в конечный момент t^* попадающая на плоскость $d'x = \alpha_0$.

Опора и опорное управление для задачи (12) определяются так же, как в п. 1 для задачи (1). Обозначения $c_{\text{оп}}$, P , $v = (v, v_{m+1})$, $\bar{H}$, $\bar{H}(t)$, $c(t)$, $\Delta(t)$, $t \in T$, совпадает с п. 1.

Разобьем задачу (12) на следующие две задачи:

$$(c^+)'x(t^*) \rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0,$$

$$Hx(t^*) = g, \quad d'x(t^*) \geq \alpha_0, \quad |u(t)| \leq 1, \quad t \in T; \quad (13)$$

$$(c^-)'x(t^*) \rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0,$$

$$Hx(t^*) = g, \quad d'x(t^*) \leq \alpha_0, \quad |u(t)| \leq 1, \quad t \in T, \quad (14)$$

где $c^+ = c + f^+ d$, $c^- = c + f^- d$.

Обозначим: $D(t) = d'F(t^*, t)b$, $t \in T$, $D_{\text{оп}} = (D(t), t \in T_{\text{оп}})$, $\bar{\eta}' = (\eta, \eta_{m+1})' = D_{\text{оп}} P^{-1}$, $\Omega(t) = (\bar{\eta}' \bar{H} - d')F(t^*, t)b$, $t \in T$. Тогда векторы потенциалов v^+ , v^- для задач (13), (14) примут вид: $v^+ = (v^+, v_{m+1}^+) = (v + f^+ \eta, v_{m+1} + f^+ \eta_{m+1})$, $v^- = (v^-, v_{m+1}^-) = (v + f^- \eta, v_{m+1} + f^- \eta_{m+1})$.

Коуправления $\Delta^+(t)$, $\Delta^-(t)$, $t \in T$, для задач (13), (14) имеют вид: $\Delta^+(t) = \Delta(t) + f^+ \Omega(t)$, $\Delta^-(t) = \Delta(t) + f^- \Omega(t)$, $t \in T$.

Из приведенных выкладок и теоремы 1 следует

Теорема 3. Для оптимальности опорного управления $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ задачи (12) достаточно, а в случае его невырожденности и необходимо, чтобы выполнялись соотношения:

- 1) $\Delta(t) + f^+ \Omega(t) \leq 0$, $\Delta(t) + f^- \Omega(t) \leq 0$ при $u(t) = 1$;
 $\Delta(t) + f^+ \Omega(t) \geq 0$, $\Delta(t) + f^- \Omega(t) \geq 0$ при $u(t) = -1$;
 $\Delta(t) + f^+ \Omega(t) = \Delta(t) + f^- \Omega(t) = 0$ при $-1 < u(t) < 1$, $t \in T$.
- 2) $-f^- \eta_{m+1} \leq v_{m+1} \leq -f^+ \eta_{m+1}$.

ОПТИМАЛЬНАЯ ОБРАТНАЯ СВЯЗЬ ПО ВЫХОДУ

A new statement of output optimal feedback extending classical optimal state feedback for deterministic system is suggested. A method of realization of the optimal output feedback with the help of optimal controllers and estimators for which the algorithm of acting in real time mode was suggested by the authors earlier.

1. Управление по принципу обратной связи является главным в теории управления [1]. Классическая теория регулирования, базирующаяся на детерминированных моделях невысокого порядка, основное внимание уделяла обратным связям по состоянию, предполагающим возможность точного измерения всех компонент текущего состояния системы. В современной теории управления, имеющей дело и с неопределенными системами высокого порядка, рассматриваются чаще всего обратные связи по выходу. Они работают на информации, поставляемой доступными несовершенными измерительными устройствами (сенсорами).

В настоящее время наибольшее развитие получила теория оптимальных линейных обратных связей по выходу для линейно-квадратичных задач со стохастической гауссовой неопределенностью [2]. Для систем с нестохастической неопределенностью большее число работ в последние годы посвящено построению линейных обратных связей по выходу методами H_∞ -теории управления [3].

Задачи оптимального управления с нестохастической неопределенностью стали изучаться в конце 60-х гг. [4—6]. В работах этого направления принцип стохастической оптимизации заменялся на принцип получения гарантированного результата, естественный для нового типа неопределенности. Выбор принципа оптимальности зависит от конкретной прикладной задачи, но каждый из них имеет свою область эффективного применения.

Некоторое отставание исследований по гарантированной оптимизации неопределенных систем частично объясняется и тем, что они базируются на теории негладкого анализа, тогда как сравнительно развитая теория стохастической оптимизации использует в основном методы хорошо освоенного гладкого анализа.

В настоящей работе предложен способ реализации оптимальной обратной связи по выходу (ООСВ) для линейной терминальной задачи управления с нестохастической неопределенностью в начальном состоянии оптимизируемой системы. Под выходными сигналами понимаются показания сенсоров, измеряющих с ошибкой только одну линейную комбинацию компонент вектора состояния. Реализацией ошибки во времени может оказаться любая кусочно-непрерывная функция. Задача оптимального управления состоит в том, чтобы на базе доступной в настоящее время информации с помощью ограниченного воздействия перевести с гарантией динамическую систему на заданное терминальное множество и обеспечить максимум наихудшему возможному значению терминального критерия качества.

Основная цель работы — ввести понятие ООСВ как аналог классической оптимальной обратной связи по состоянию (ООСС) и предложить метод его реализации. Предлагаемый подход представляет собой синтез идей двух предыдущих работ [7, 8]. Полученные результаты формулируются в терминах гибкой оптимальной обратной связи по выходу (ГООСВ), которая с помощью m оптимальных эстиматоров и одного оптимального регулятора реализует в режиме реального времени ООСВ.

2. В классе кусочно-непрерывных управлений $u(t)$, $t \in T = [0, t^*]$, рассмотрим линейную задачу терминального управления:

$$\begin{aligned} \dot{x}_0(t^*) &\rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0, \\ x(t^*) \in X^* &= \{x \in R^n: h_i x \leq g_i, \quad i = \overline{1, m}\}, \end{aligned} \quad (1)$$

$|u(t)| \leq 1$, $t \in T$ ($x \in R^n$, $u \in R$, $\text{rank}(b, Ab, \dots, A^{n-1}b) = n$), в которой начальное состояние x_0 известно неточно и задано априорным распределением X_0 [8]:

$$x_0 \in \tilde{X}_0 = \{x \in R^n: d_j x \leq \gamma_j, \overline{j = 1, l}\}. \quad (2)$$

Предположим, что в процессе управления поступает дополнительная информация о поведении системы (о реализовавшемся начальном состоянии) только от сенсора

$$y = c'x + \xi \left(\text{rank}(c, A'c, \dots, (A')^{n-1}c) = n \right), \quad (3)$$

который в каждый момент $t \in T$ с ошибкой $\xi(t)$ измеряет линейную комбинацию $c'x(t)$. При этом известно, что в качестве функции ошибок измерения $\xi(t)$, $t \in T$, может реализоваться любая кусочно-непрерывная функция, удовлетворяющая условию

$$\xi, \xi(t) \leq \xi^*, t \in T(\xi, \xi^* - \text{const}). \quad (4)$$

Используя сигнал $y(\cdot) = (y(t), t \in T)$, с помощью доступного управления $u(\cdot)$ нужно перевести с гарантией систему (1) в момент t^* на заданное терминальное множество X^* и обеспечить максимум наихудшему возможному значению критерия качества.

Если измерения сенсора (3), (4) не используются, то это означает, что априорное оптимальное управление $\dot{u}^0(\cdot)$ переводит в момент t^* все точки $x_0 \in \tilde{X}_0$ на X^* и обеспечивает максимальное значение функционалу

$$\min h_0'x, x \in \tilde{X}_{t^*},$$

где $\tilde{X}_{t^*}$ — множество всех возможных терминальных состояний.

Пусть в процессе управления можно использовать сигналы $y(t)$, $t \in T$, сенсора. Тогда в произвольный момент $\tau > 0$, опираясь на сигнал $y, (\cdot) = (y(t), t \in T, \tau = [0, \tau])$ и известное управление $u, (\cdot)$, можно отбросить все точки $x_0 \in \tilde{X}_0$, которые не совместимы с сигналом $y, (\cdot)$. После этого задача управления на промежутке $T' = [\tau, t^*]$ упрощается: нужно перевести с гарантией на множество X^* только оставшуюся часть $X_0(\tau, u, (\cdot), y, (\cdot))$ множества $\tilde{X}_0$. Отсюда ясно, что привлечение сенсора может повысить эффективность управления. Так возникает проблема построения ООСВ для задачи (1)–(4).

Для строгого определения ООСВ погрузим задачу (1)–(3) в семейство аналогичных задач на промежутке T' с начальным условием

$$x(\tau) \in X, (\tau, u, (\cdot), y, (\cdot)).$$

Здесь $u, (\cdot)$ — управление, использованное на промежутке T' , $y, (\cdot)$ — сигнал сенсора, записанный к моменту τ ,

$$X, (\tau, u, (\cdot), y, (\cdot)) =$$

$$x(\tau | 0, X_0(\tau, y^0(\cdot), u, (\cdot)), X_0(\tau, y^0(\cdot)))$$

— апостериорное распределение [8] начального состояния x_0 , соответствующее паре

$$(\tau, y^0(\cdot)), y^0(t) = y^*(t) - c' \int_0^t F(t, s) b u^*(s) ds,$$

$$t \in T'; F(t, s) = F(t)F^{-1}(s), \dot{F} = AF, F(0) = E.$$

Тройку $\dot{s}, (\tau, u, (\cdot), y, (\cdot))$ назовем позицией процесса управления в момент $t = \tau$.

Кусочно-непрерывную функцию

$$u'(\cdot | s, \tau) = (u(t | \tau, u, (\cdot), y, (\cdot)), t \in T'),$$

удовлетворяющую ограничению из (1): $|u(t)| \leq 1$, $t \in T$, назовем допустимым (гарантированным) программным управлением для позиции s, τ , если для соответствующего ей множества

$$X_{t^*}(\tau, u'(\cdot)) = \{x(t^* | \tau, x, u'(\cdot | s, \tau)), x \in X, (s, \tau)\}$$

выполняется условие

$$X_{i*}(u^*(\cdot)) \subset X^*.$$

Допустимое управление $u^0(\cdot | s_r)$ будем называть оптимальным программным управлением для позиции s_r , если

$$\min_{x \in X_{i*}(u^0(\cdot | s_r))} h_0'x = \max_{u^*(\cdot | s_r)} \min_{x \in X_{i*}(u^*(\cdot))} h_0'x.$$

Обозначим через $S_r, \tau \in T$, множество всех позиций, для которых существуют оптимальные программные управления.

Определение. Функционал

$$u_0(\tau, u_r(\cdot), y_r(\cdot)) = u^0(\tau | \tau, u_r(\cdot), y_r(\cdot)), \\ (\tau, u_r(\cdot), y_r(\cdot)) \in S_r, \tau \in T, \quad (5)$$

называется ООСВ для задачи (1)–(4).

Ясно, что построение функционала (5) — задача не менее сложная, чем синтез классической ООСС [1]. Для реализации ООСВ воспользуемся подходом, предложенным в [7] для реализации классической ООСС, и позиционным решением задачи оптимального наблюдения [8].

3. Предположим, что ООСВ построена. Замкнем ею систему (1) и рассмотрим поведение замкнутой системы в некотором конкретном процессе управления, когда на систему действует неизвестное аддитивное возмущение $w^*(t), t \in T$:

$$\dot{x} = Ax + bu^0(t, u_1^*(\cdot), y_1^*(\cdot)) + w^*(t), \\ y^*(t) = c'x^*(t) + \xi^*(t), u_1^*(\cdot) = u^0(\tau, u_1^*(\cdot), y_1^*(\cdot)), \quad 0 \leq \tau \leq t. \quad (6)$$

Нетрудно видеть, что для управления этим процессом нужны не вся ООСВ и не сразу, а только ее значения

$$u^*(t) = u^0(t, u_1^*(\cdot), y_1^*(\cdot)), \quad t \in T,$$

вдоль фиксированной кривой $s_t^* = (t, u_1^*(\cdot), y_1^*(\cdot)), t \in T$, в пространстве позиций. При этом значение $u^*(\tau) = u^0(\tau, u_1^*(\cdot), y_1^*(\cdot))$ потребуется не в начальный момент $t = 0$, а лишь в момент τ реализации текущей позиции s_τ^* .

Любое устройство, которое способно в режиме реального времени вычислять значения $u^*(t), t \in T$, по ходу каждого конкретного процесса управления, назовем гибкой оптимальной обратной связью по выходу (ГООСВ).

Таким образом, задача реализации (5) свелась к составлению алгоритма работы ГООСВ. Этот алгоритм будет описан в п. 4, а пока расширим понятие ООСВ для задачи (1)–(4).

Специфика задачи (1)–(4) такова, что в реальных условиях при постоянном действии неизвестных возмущений замкнутая система (6) часто будет функционировать только на части $[0, t^0], t^0 < t^*$, интервала T . Останов в момент $t = t^0$ может произойти по одной из двух причин.

1) Система выйдет на границу множества управляемости S_{t^0} , 2) множество $X_{t^0}(t^0, u_{1^0}^*(\cdot), y_{1^0}^*(\cdot))$ станет пустым.

В первом случае для продолжения процесса управления при $t \geq t^0$ вместо задачи (1)–(4) используем решение задачи

$$\max_{1 \leq i \leq m} (h_i'x(t^*) - g_i) \rightarrow \min_u, \\ \dot{x} = Ax + bu, x(\tau) \in X_r(\tau, u_r^*(\cdot), y_r^*(\cdot)), \\ |u(t)| \leq 1, t \in T^*. \quad (7)$$

Во втором случае задачу (1)–(4) при $t \geq t^0$ заменим на

$$\begin{aligned} h_0'x(t^*) &\rightarrow \max, \\ \dot{x} &= Ax + bu, \quad x(\tau) \in \bar{X}, \quad x(t^*) \in X^*, \\ |u(t)| &\leq 1, \quad t \in T', \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\bar{X} = \left\{ x(\tau) = F(\tau, 0)x_0 + \int_0^\tau F(\tau, s)bu^*(s)ds, \quad x_0 \in \bar{X}_0 \right\},$$

$\bar{X}_0$ — множество решений задачи

$$\begin{aligned} \alpha &\rightarrow \min, \quad \xi_0 - \alpha \leq y^*(t) - c'F(t, 0)x \leq \xi_0^* + \alpha, \\ t &\in T, \quad d_j x \leq y_j, \quad j = \overline{1, l}. \end{aligned} \quad (9)$$

Другой (менее универсальный) способ продолжения процесса управления для $t \geq t^0$ состоит в изменении длительности t^* процесса управления. Если останов базового процесса произошел по первой причине, то вместо задачи (1) — (4) используем задачу оптимального быстрогодействия

$$\begin{aligned} t^* &\rightarrow \min, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(\tau) \in X, \quad (\tau, u^*(\cdot), y^*(\cdot)), \\ x(t^*) &\in X^*, \quad |u(t)| \leq 1, \quad t \in T'. \end{aligned}$$

Во втором случае, когда $X_{t^0} = \emptyset$ для $t \geq t^0$, вместо $X_0(\tau, y^0(\cdot))$ используем множество $\bar{X}_0(\tau, y^0(\cdot))$ решений задачи оптимального наблюдения по быстрдействию

$$\begin{aligned} t^* &\rightarrow \min, \quad \xi_0 \leq y^0(t) - c'F(t, 0)x_0 \leq \xi_0^*, \\ t_0 &\leq t \leq t^*, \quad x_0 \in \bar{X}_0. \end{aligned}$$

4. Опишем алгоритм работы ГООСВ лишь для базовой задачи (1) — (4), ибо для задач (7) — (9) он аналогичен. Следуя [7], нетрудно показать, что значение $u^*(\tau)$ совпадает со значением $\bar{u}^0(\tau)$ оптимального управления $\bar{u}^0(t; \alpha_1^*(\tau), \dots, \alpha_m^*(\tau))$, $t \in T'$, детерминированной задачи

$$\begin{aligned} h_0'x(t^*) &\rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(\tau) = 0, \\ h_i'x(t^*) &\leq g_i - \alpha_i^*(\tau), \quad i = \overline{1, m}; \end{aligned}$$

$$|u(t)| \leq 1, \quad t \in T',$$

где $\alpha_i^*(\tau) = \alpha_i(\tau, y^0(\cdot))$, $i = \overline{1, m}$, — значения линейных задач оптимального наблюдения

$$\alpha_i^*(\tau) = \max_x h_i'x, \quad x \in X, \quad (\tau, y^0(\cdot)). \quad (10)$$

Оптимальное гарантированное значение критерия качества задачи (1) — (4) равно

$$J(u^0) = h_0'\bar{x}^0(t^*) - \alpha_0^*(\tau),$$

где $\alpha_0^*(\tau)$ — значение задачи (10) при $i = 0$.

Таким образом, построение алгоритма работы ГООСВ свелось к m задачам реализации позиционных решений линейных задач оптимального наблюдения и одной задаче реализации оптимальной обратной связи по вектору $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ для детерминированной задачи оптимального управления. В [7—9] описаны алгоритмы работы оптимального регулятора и эстиматоров, которые реализуют позиционные решения.

Подведем итог: оптимальная гибкая обратная связь по выходу состоит из m оптимальных эстиматоров [8] и одного оптимального регулятора [7].

5. Отметим следующие особенности полученного результата: 1) ООСВ, определенная на функциональном пространстве, сводится к оптимальной обратной связи по конечному числу оценок; 2) количество и содержание оценок полностью определяются исходной задачей оптимального управления; 3) оценки $\alpha_1, \dots, \alpha_m$ представляют оценки терминальных ограничений и лишь косвенно — оценки состояний оптимизируемой системы; 4) для задачи построения ООСВ справедлив *принцип разделения*, согласно которому сначала независимо от управления решаются задачи наблюдения, а затем по результатам наблюдения (оценкам) строится оптимальное управление; 5) обратная связь (5) введена в полную аналогии с классической обратной связью по состоянию. Однако между классической моделью задачи и задачей данной работы есть существенная разница: классическая модель (даже в случае управления по выходу) не содержит неопределенностей, в исследуемой модели имеются два источника неопределенности. В связи с этим возможны различные типы обратных связей. Обратную связь (5) можно, следуя [10], назвать размыкаемой. Более сложные (замыкаемые) обратные связи можно исследовать изложенными методами. Наиболее полными («истинными») являются замкнутые обратные связи, для построения которых в задаче (1)—(4) пока не предложено эффективных методов; 6) относительно действующих на систему управления возмущений нет никакой информации. ООСВ определяется для задачи без учета аддитивных возмущений и поэтому вопрос об ее оптимальности относительно возмущений не имеет смысла; 7) ГООСВ в каждом процессе вырабатывает в режиме реального времени такие управления, которые циркулировали бы в системе, замкнутой ООСВ.

1. Ф е л ь д б а у м А. А. Основы теории оптимальных автоматических систем. М., 1961.
2. О с т р е м К. Введение в стохастическую теорию управления. М., 1973.
3. S t o o r v o g e l A. A. The H_∞ control problem: a state space approach. Englewood Cliffs, 1992.
4. S c h w e r p e F. C. Uncertain dynamic system. Englewood Cliffs, 1973.
5. W i t s e n h a u s e H. S. // IEEE Trans. Automat. Control. 1968. V. AC-13. № 1.
6. К р а с о в с к и й Н. Н. Теория управления движением. М., 1968.
7. Г а б а с о в Р., К и р и л л о в а Ф. М., К о с т ю к о в а О. И. // Докл. АН СССР. 1991. Т. 320. № 6.
8. Г а б а с о в Р., К и р и л л о в а Ф. М., К о с т ю к о в а О. И. // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1992. № 2.
9. Г а б а с о в Р., К и р и л л о в а Ф. М., К о с т ю к о в а О. И. // Автоматика и телемеханика. 1993. № 4.
10. Фильтрация и стохастическое управление в динамических системах/ Под ред. К. Т. Леондеса. М., 1973.

Поступила в редакцию 18.02.94.

УДК 519.853.32

А. В. ЦОКАТАЕВ, Т. В. ЧЕМИСОВА

АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ С ПРОСТЫМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ НА ПЕРЕМЕННЫЕ

The combined algorithm for solving the separable problem of geometric programming with box constraints on variables is suggested. The algorithm consists of two types of iterations, based on the new principle of choosing the suitable direction.

Важным разделом математического программирования является геометрическое программирование (ГП). Его модели находят широкое применение в различных областях науки и техники и, в частности, при решении целого ряда инженерных задач [1, 2].

Рассмотрим пару двойственных задач ГП с простыми ограничениями на переменные в сепарабельной форме:

$$g(z, x) = \sum_{i \in I} c^{x_i} \rightarrow \min, \quad (1)$$

$$x = Az + b, \quad d_* \leq z \leq d^*,$$

где $z = (z_j, j \in J)$, $J = \{1, 2, \dots, m\}$; $x = (x_i, i \in I)$, $I = \{1, 2, \dots, n\}$; $A - (n \times m)$ -матрица экспонент, $n > m$, $\text{rank } A = m$; $b \in R^n$; d_* , $d^* \in R^m$;

$$\varphi(\lambda, v_*, v^*) = \sum_{i \in I} \lambda_i (1 + b_i - \ln \lambda_i) + v_* \cdot d_* - v^* \cdot d^* \rightarrow \max, \quad (2)$$

$$A^* \lambda - v_* + v^* = 0,$$

$$v_* \geq 0, \quad v^* \geq 0; \quad \lambda > 0,$$

где $\lambda = (\lambda_i, i \in I)$, $v_* = (v_{*j}, j \in J)$, $v^* = (v^*_j, j \in J)$.

Предлагается комбинированный алгоритм решения прямой задачи (1) и двойственной задачи (2), основанный на аппроксимации их целевых функций минорантой и мажорантой соответственно, который обобщает алгоритмы [3]. Направления улучшения планов этих задач строятся на основе экстремальных свойств аппроксимирующих функций. Алгоритм состоит из итераций прямого и двойственного типов и способен переключаться с одного типа на другой, что позволяет решать задачи (1), (2) одновременно и вместе с тем повышает эффективность решения каждой из них в отдельности.

Двойственный план (λ, v_*, v^*) задачи (1) назовем согласованным, если $v_{*j} = 0$, $v^*_j = -\delta_j$ при $\delta_j \leq 0$; $v_{*j} = \delta_j$, $v^*_j = 0$ при $\delta_j > 0$, $j \in J$, где $\delta = A^* \lambda$. При заданном векторе на согласованном плане (λ, v_*, v^*) достигается максимум целевой функции двойственной задачи (2), поэтому в дальнейшем будем рассматривать только согласованные двойственные планы.

Назовем опорной задачи (1) совокупность множеств $K_0 = \{I_0, J_0\}$, $I_0 \subset I$, $J_0 \subset J$, $|I_0| = |J_0|$, для которых матрица $A_0 = A(I_0, J_0)$ невырождена [4]. Множества I_0 , J_0 будем называть опорными, множества $I_n = I \setminus I_0$, $J_n = J \setminus J_0$ — неопорными.

Обозначим $x_0 = x(I_0)$, $x_n = x(I_n)$; $z_0 = z(J_0)$, $z_n = z(J_n)$; $b_0 = b(I_0)$, $b_n = b(I_n)$. Тогда $z_0 = A_0^{-1} (x_0 - A(I_0, J_n)z_n - b_0)$. Положив $B(I_n, I_0) = A(I_n, J_0)A_0^{-1}$, $D(I_n, J_n) = A(I_n, J_n) - B(I_n, I_0)A(I_0, J_n)$, $c(I_n) = b_n - B(I_n, I_0)b_0$, задачу (1) можно представить в эквивалентном виде:

$$g(z, x) = \sum_{i \in I} e^{x_i} \rightarrow \min,$$

$$x_n = B(I_n, I_0)x_0 + D(I_n, J_n)z_n + c(I_n), \quad (3)$$

$$d_{*0} \leq A_0^{-1} (x_0 - A(I_0, J_n)z_n - b_0) \leq d_{*0}^*,$$

$$d_{*n} \leq z_n \leq d_{*n}^*,$$

где $d_{*0} = d_*(J_0)$, $d_{*n} = d_*(J_n)$, $d_{*0}^* = d^*(J_0)$, $d_{*n}^* = d^*(J_n)$.

Совокупность из плана (z, x) задачи (3) и опоры K_0 будем называть опорным планом (z, x, K_0) ; а опорный план — невырожденным, если $d_{*0} < z_0 < d_{*0}^*$. Будем считать, что двойственный план λ сопровождает опору K_0 , если $\delta(J_0) = 0$, т. е. $\lambda_0 = -(A_0^*)^{-1} A^*(I_n, J_0) \lambda_n$. Учитывая ограничения типа равенств задачи (2), получим $\delta(J_n) = D^*(I_n, J_n) \lambda_n$.

Остановимся на подробном описании итераций прямого типа.

В начале работы алгоритма имеем некоторый невырожденный опорный план (z, x, K_0) задачи (1) и согласованный двойственный план λ , сопровождающий опору K_0 . На первой итерации $K_0 = \emptyset$.

Теорема 1. Пусть (z, x, K_0) — невырожденный опорный план. Для оптимальности плана (z, x) необходимо, чтобы выполнялись соотношения:

$$e^{x_i} + r_i(x) = 0, \quad i \in I_0;$$

$$\Delta_j(x) \geq 0 \quad \text{при } z_j = d_{*j}; \quad \Delta_j(x) \leq 0 \quad \text{при } z_j = d_{*j}^*;$$

$$\Delta_j(x) = 0 \quad \text{при } d_{*j} < z_j < d_{*j}^*, \quad j \in J_n, \quad (4)$$

где

$$r_i(x) = \sum_{j \in I_H} b_{ij} e^{x_j}, i \in I_0; \Delta_j(x) = \sum_{i \in I_H} d_{ij} e^{x_i}, j \in J_H.$$

2. Пусть для опорного плана (z, x, K_0) выполняются соотношения (4). Тогда план (z, x) является оптимальным.

Пусть на опорном плане (z, x, K_0) задачи (3) не выполнены условия оптимальности (4), пара (l, y) — допустимое направление, т. е. она удовлетворяет соотношениям:

$$y_H = B(I_H, I_0)y_0 + D(I_H, J_H)l_H, \\ l_0 = A_0^{-1}(y_0 - A(I_0, J_H)l_H), d_{\cdot H} - z_H \leq l_H \leq d_{\cdot H}^* - z_H, \quad (5)$$

где

$$l = (l_j, j \in J), l_0 = l(J_0), l_H = l(J_H); y = (y_i, i \in I), \\ y_0 = y(I_0), y_H = y(I_H).$$

Положим

$$\psi_1(z, x, \lambda) = \sum_{i \in I_0} (e^{x_i} - \lambda_i x_i) + \sum_{i \in I_H} (\lambda_i + \lambda_i c_i - \lambda_i \ln \lambda_i) + \sum_{j \in J_H} \delta_j z_j,$$

$$\psi_2(x, l, y) = \sum_{i \in I_0} (e^{x_i + y_i} + r_i(x) y_i) + \sum_{i \in I_H} e^{x_i} + \sum_{j \in J_H} \Delta_j(x) l_j.$$

Следуя [3], можно показать, что справедливы неравенства:

$$g(z, x) \geq \psi_1(z, x, \lambda), g(z + l, x + y) \geq \psi_2(x, l, y). \quad (7)$$

На k -той итерации прямого типа направление (l, y) улучшения прямого плана (z^k, x^k) будем находить из подзадачи минимизации миноранты $F^k(l_H, y_0)$, составленной на основании (6), (7):

$$F^k(l_H, y_0) = \\ = \max_{l \in M} \{ \psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda), \psi_2(x^k, z^k - z^k + l, x^k - x^k + y) \} \rightarrow \min, \\ d_{\cdot H} - z_H^k \leq l_H \leq d_{\cdot H}^* - z_H^k,$$

$M \subset \{1, 2, \dots, k\}$ — множество индексов, формируемое на итерациях алгоритма. На первой итерации $M = \{1\}$.

Лемма 1. Пусть вектор (l_H, y_0) является решением задачи (8), а компоненты l_0, y_H построены по формулам (5). Тогда

$$dg(z^k + \theta l, x^k + \theta y) / d\theta|_{\theta=0} < 0.$$

Шаг θ вдоль направления (l, y) убывания целевой функции задачи (3) вычисляем по формуле

$$\theta_0 = \min \{1, \theta_{j_0}, \theta_g\}, \text{ где } \theta_{j_0} = \min_{j \in J_0} \theta_j; \theta_j = (d_j^* - z_j^k) / l_j,$$

если

$$l_j > 0; \theta_j = (d_j - z_j^k) / l_j,$$

если $l_j < 0; \theta_j = +\infty$, если $l_j = 0, j \in J_0; \theta_g = \arg \min_{\theta \geq 0} g(x^k + \theta y)$.

После того, как решена задача (8) и вычислен шаг θ_0 вдоль направления, преобразуем опору K_0 :

1. Если

$$\theta_0 = \theta_{j_0}, j_0 \in J_0, \text{ то } \bar{J}_0 = J_0 \setminus j_0, \bar{I}_0 = I_0 \setminus i_0,$$

где

$$|\alpha_{i_0}| = \max_{i \in I_0} |\alpha_i|, \alpha_i = A_0^{-1}(i, j_0) \neq 0, i \in I_0.$$

2. Если $\theta_0 = \theta_g < \theta_{\min}$, где $\theta_{\min}$ — параметр алгоритма, то $\bar{J}_0 = J_0 \cup j_1, \bar{I}_0 = I_0 \cup i_1$. Индекс j_1 находим из условия

$$\sigma_{j1} = \min \sigma_j; \sigma_j = +\infty, \text{ если } \Delta_j(0)\Delta_j(\theta_0) \geq 0;$$

$$\sigma_j = -\frac{\Delta_j(0)\theta_0}{\Delta_j(\theta_0) - \Delta_j(0)}, \text{ если } \Delta_j(0)\Delta_j(\theta_0) < 0, j \in J_n;$$

$$|\alpha_{i1}| = \max_{i \in I_n} |\alpha_i|, \text{ где } \alpha_i = A(i, j_1) - A(i, J_0)A_0^{-1}A(I_0, j_1), i \in I_n.$$

Здесь

$$\Delta_j(0) = \sum_{i \in I_n} d_{ij} e^{x_i^k}, \quad \Delta_j(\theta_0) = \sum_{i \in I_n} d_{ij} e^{x_i^k + \theta_0 y_i}.$$

Преобразованной опорой будет совокупность $K_0 = \{\bar{I}_0, \bar{J}_0\}$.

В конце каждой итерации прямого типа по формулам (5) строим зависимые компоненты направления (l, y) , переходим к новому плану (z^{k+1}, x^{k+1}) задачи (3), где $z^{k+1} = z^k + \theta_0 l$, $x^{k+1} = x^k + \theta_0 y$, и осуществляем проверку критерия останова алгоритма.

Лемма 2. Пусть вектор (l_n^0, y_0^0) — решение задачи (8). Для ε -оптимальности плана задачи (3) достаточно, чтобы выполнялось неравенство

$$g(z^k, x^k) - F^k(l_n^0, y_0^0) \leq \varepsilon.$$

Остановимся подробнее на решении задачи (8). Пусть вначале $M = \{k\}$. Возможна одна из следующих ситуаций: а) минимум миноранты $F^k(l_n, y_0) = \max\{\psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda), \psi_2(x^k, l, y)\}$ достигается на функции $\psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda)$; б) минимум достигается на функции $\psi_2(x^k, l, y)$; в) в точке минимума миноранты $\psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda) = \psi_2(x^k, l, y)$.

Проверка этих условий заключается в следующем:

а) находим $y_i = \ln \lambda_i - x_i^k$, $i \in I$ и полагаем $l_j = d_{\cdot j} - z_j^k$ при $\delta_j > 0$; $l_j = d_j^* - z_j^k$ при $\delta_j < 0$; $l_j = 0$ при $\delta_j = 0$, $j \in J_n$. Проверяем неравенство $\psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda) \geq \psi_2(x^k, l, y)$. Если оно выполнено, то (l_n, y_0) — решение задачи (8). Положив $M = M \cup \{k+1\}$, переходим к поиску шага вдоль направления. Проверку условия а) осуществляем только на первой итерации;

б) если $r_i(x^k) < 0$ для каждого $i \in I_0$, то вычисляем

$$y_i = \ln(-r_i(x^k)) - x_i^k, i \in I_0;$$

$$l_j = \begin{cases} d_{\cdot j} - z_j^k, & \text{если } \Delta_j(x^k) > 0, \\ d_j^* - z_j^k, & \text{если } \Delta_j(x^k) < 0, \\ 0, & \text{если } \Delta_j(x^k) = 0, j \in J_n \end{cases} \quad (9)$$

и проверяем условие $\psi_2(x^k, l, y) \geq \psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda)$. Если оно выполнено, то построенное направление (l_n, y_0) — решение задачи (8). Поскольку двойственный план λ не влияет на выбор направления, то, построив новый опорный план $(z^{k+1}, x^{k+1}, \bar{K}_0)$, переходим к итерациям двойственного типа;

в) в этом случае задача (8) равносильна задаче с ограничениями:

$$\psi_2(x^k, l, y) \rightarrow \min, \psi_1(z^k + l, x^k + y, \lambda) = \psi_2(z^k, l, y),$$

$$d_{\cdot j} - z_j^k \leq l_j \leq d_j^* - z_j^k, j \in J_n.$$

Из условий оптимальности для этой задачи относительно переменных y_i , $i \in I_0$; l_j , $j \in J_n$ и множителей Лагранжа $\omega_0, w_{\cdot j}, w_j^*$, $j \in J_n$ можно получить, что

$$y_i = y_i(\omega_0) = \ln \left(\omega_0 (r_i(x^k) + \lambda_i) - r_i(x^k) \right) - x_i^k, \quad i \in I_0, \quad (10)$$

$$\rho_j = \rho_j(\omega_0) = \Delta_j(x^k) + \omega_0 (\delta_j - \Delta_j(x^k)), \quad j \in J_H; \quad (11)$$

где $\rho_j = w_{\cdot j} - w_j^*$;

$$l_j = l_j(\omega_0) = \begin{cases} d_{\cdot j} - z_j^k, & \text{если } \rho_j(\omega_0) > 0, \\ d_j^* - z_j^k, & \text{если } \rho_j(\omega_0) < 0, \\ 0, & \text{если } \rho_j(\omega_0) = 0, \end{cases} \quad j \in J_H, \quad (12)$$

где ω_0 — корень нелинейного уравнения [5]:

$$\sum_{i \in I_0} \left(y_i(\omega_0) (r_i(x^k) + \lambda_i) + \lambda_i x_i^k \right) + \sum_{j \in J_H} (l_j(\omega_0) (\Delta_j(x^k) - \delta_j) + \delta_j z_j^k) + \sum_{i \in I_H} \left(e^{x_i^k} - \lambda_i - \lambda_i c_i + \lambda_i \ln \lambda_i \right) = 0. \quad (13)$$

Лемма 3. Уравнение (13) имеет единственное решение на отрезке $[0, 1]$.

Положив $\bar{M} = M \cup \{k+1\}$, завершаем итерацию.

Пусть теперь после $(k-1)$ -й итерации ($k \geq 2$) получен прямой опорный план (z^k, x^k, K_0) и построено множество M , $|M| > 1$. Проверим вначале, не достигает ли миноранта $F^k(l_H, y_0)$ минимума на функции $\psi_2(x^k, y, 1)$. Если $r_i(x^k) < 0$, $i \in I_0$, то вычисляем компоненты y_i , $i \in I_0$, l_j , $j \in J_H$ согласно (9) и проверяем условие:

$$\psi_2(x^k, y, 1) \geq \max_{i \in M/k} \left\{ \psi_1(z^k + 1, x^k + y, \lambda), \psi_2(x^k, z^k - z^i + 1, x^k - x^i + y) \right\}.$$

Если оно выполнено, то, построив новый опорный план $(z^{k+1}, x^{k+1}, \bar{K}_0)$, переходим на итерации двойственного типа.

В противном случае для решения задачи (8) введем вспомогательную переменную ξ :

$$\xi = \max_{i \in M} \left\{ \psi_1(z^k + 1, x^k + y, \lambda), \psi_2(x^i, z^k - z^i + 1, x^k - x^i + y) \right\}.$$

Получаем эквивалентную (8) задачу с ограничениями относительно переменных ξ ; y_i , $i \in I_0$; l_j , $j \in J_H$:

$$\begin{aligned} \xi &\rightarrow \min, \\ \psi_1(z^k + 1, x^k + y, \lambda) &\leq \xi, \quad \psi_2(x^i, z^k - z^i + 1, x^k - x^i + y) \leq \xi, \quad i \in M, \\ d_{\cdot j} - z_j^k &\leq l_j \leq d_j^k - z_j^k, \quad j \in J_H. \end{aligned} \quad (14)$$

Решение задачи (14) с использованием условий оптимальности Куна—Таккера сводится к решению системы нелинейных уравнений относительно множителей Лагранжа ω_i , $i \in M$:

$$\begin{aligned} \sum_{i \in I_0} \left(y_i(\omega_p, p \in M) (r_i(x^s) + \lambda_i) + \lambda_i x_i^k \right) + \sum_{j \in J_H} \left(l_j(\omega_p, p \in M) (\Delta_j(x^s) - \delta_j) + \Delta_j(x^s) (z_j^k - z_j^s) - \delta_j z_j^k \right) + \sum_{i \in I_H} \left(e^{x_i^k} - \lambda_i - \lambda_i c_i + \lambda_i \ln \lambda_i \right) &= 0, \quad s \in M. \end{aligned}$$

В качестве начальных приближений ω_i^0 , $i \in M$ для системы (15) используем множители Лагранжа, полученные на предыдущей итерации. Если для вектора $(\omega_i, i \in M)$, являющегося решением системы (15), $\omega_{i_0} = \min_{i \in M} \omega_i \leq 0$, то исключаем индекс i_0 из множества M : $\bar{M} = M \setminus i_0$ и вновь решаем систему. В итоге все множители $\omega_i > 0$, $i \in M$. Если значение $\omega_0 = 1 - \sum_{i \in M} \omega_i > 0$, то, положив $\bar{M} = M \cup \{k+1\}$, завершаем итерацию.

Если $\omega_0 < 0$, то переходим с опорным планом $(z^{k+1}, x^{k+1}, \bar{K}_0)$ к итерациям двойственного типа.

1. Зенер К. Геометрическое программирование и техническое проектирование. М., 1973.

2. Даффин Р., Питерсон Э., Зенер К. Геометрическое программирование. М., 1972.

3. Покатаев А. В. // Докл. АН БССР. 1984. Т. 28. № 6. С. 492.

4. Габасов Р., Кириллова Ф. М. Методы линейного программирования. Мн., 1980. Ч. 3.

5. Касько Т. В., Покатаев А. В. Алгоритм линейной аппроксимации для решения задачи безусловной оптимизации геометрического программирования. Мн., 1988. (Препринт/ИМ АН БССР. № 7 (317)).

Потупила в редакцию 22.07.93.



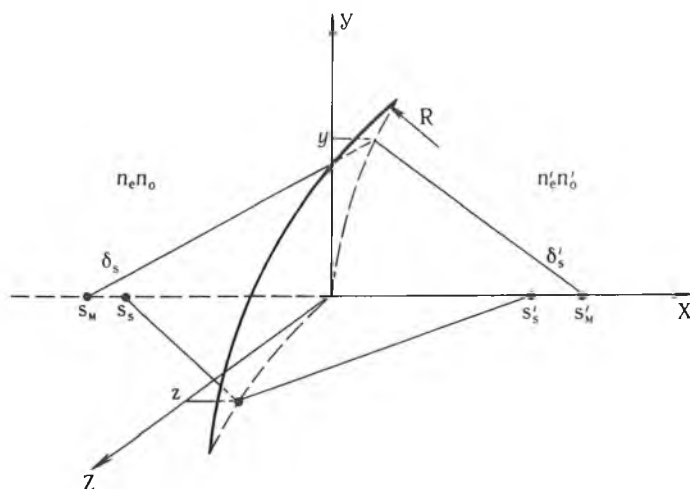
УДК 535.31

В. В. ЕРМАКОВ, И. В. СТАШКЕВИЧ

ПЕРВИЧНЫЙ АСТИГМАТИЗМ ОПТИЧЕСКИХ СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ АНИЗОТРОПНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

An optical system containing anisotropic components has been considered. It has been shown that such components contribute to the primary astigmatism for axial object points. The value of this astigmatism has been calculated. Some ways for its compensation have been proposed.

Рассмотрим оптическую систему, состоящую из двулучепреломляющих сред, оптические оси которых параллельны друг другу. На рисунке показаны две такие среды, разделенные сферической поверхностью. Выберем два параксиальных луча. Один распространяется в плоскости кристаллической оси YOX (меридианальный), другой в плоскости ZOX (сагитальный). Показатель преломления для сагитального луча будет равен n_e независимо от направления распространения луча, поэтому сагитальные лучи будут распространяться так же, как и в изотропной среде с показателем преломления n_e . Показатель преломления для меридианального луча будет зависеть от направления его распространения. Все это может привести к тому, что сагитальные и меридианальные лучи будут фокусироваться в разных точках, т. е. к возникновению астигматизма даже для осевой точки предмета.



Вычислим астигматизм. В соответствии с [1] закон преломления для параксиального луча в меридианальной плоскости будет иметь вид:

$$\frac{n_o^2}{n'_e} \cos \beta' - \frac{n_o^2}{n_e} \cos \beta = \frac{n_e - n_e'}{R} y, \quad (1)$$

в сагитальной плоскости:

$$n'_e \cos \gamma' - n_e \cos \gamma = \frac{n'_e - n_e}{R} z. \quad (2)$$

Здесь и далее величины без штриха относятся к средам до прелом-

ления, со штрихом — после; α, β, γ — углы луча с осями X, Y, Z соответственно; y, z — координаты пересечения луча с преломляющей поверхностью; R — радиус преломляющей поверхности.

Разделив формулу (1) на y , а формулу (2) на z , с учетом соотношений параксиальной оптики $y/\cos \beta = s_m, z/\cos \gamma = s_s$, получаем:

$$\frac{n_e + \epsilon}{s_m} - \frac{n'_e + \epsilon'}{s'_m} = \frac{n_e - n'_e}{R}, \quad (3)$$

$$\frac{n_e}{s_s} - \frac{n'_e}{s'_s} = \frac{n_e - n'_e}{R}, \quad (4)$$

где $\epsilon = (n_o^2 - n_e^2)/n_e$; s_s, s_m — меридианальный и сагитальный фокус пучка.

Вычисление астигматизма $\delta s = s_m - s_s$ проведем с помощью метода для вычисления хроматизма положения [2]. Из (3) вычтем (4), при этом предполагается, что $\delta s \ll s = s_m \approx s_s$ и соответственно $y \approx z = h$:

$$\frac{n'_e \delta s'}{s'^2} - \frac{n_e \delta s}{s^2} = \frac{\epsilon'}{s'} - \frac{\epsilon}{s}. \quad (5)$$

Чтобы перейти к общему случаю системы, состоящей из p поверхностей, замечаем, что

$$\delta s'_k = \delta s_{k+1}; \quad \epsilon'_k = \epsilon_{k+1}; \quad h_k/s'_k = \alpha'_k = h_k/s_{k+1} = \alpha_{k+1}. \quad (6)$$

Применив формулу (5) для всех поверхностей, умножая обе ее части на h_k^2 и складывая все полученные уравнения с учетом (6), имеем:

$$n'_{ep} \alpha_p'^2 \delta s'_p - n_{e1} \alpha_1^2 \delta s_1 = - \sum_1^p h_k (\epsilon'_k \alpha'_k - \epsilon_k \alpha_k). \quad (7)$$

В левой части величина δs_1 , относящаяся к точке-предмету, обычно равна нулю. Тогда формула (7) принимает окончательный вид:

$$\delta s'_p = - \frac{1}{n'_{ep} \alpha_p'^2} \sum_1^p h_k (\epsilon'_k \alpha'_k - \epsilon_k \alpha_k). \quad (8)$$

В качестве примера рассмотрим астигматизм, создаваемый одной кристаллической линзой с показателями преломления n_o, n_e в воздухе. При этом $\epsilon'_1 = \epsilon_2 = \epsilon = (n_o^2 - n_e^2)/n_e$, $\epsilon_1 = \epsilon'_2 = 0$, $n_{e1} = n_{e3} = 1$, с учетом (6) формула (8) принимает вид:

$$\delta s_3 = \epsilon \frac{(h_2 - h_1) \alpha_2}{\alpha_3^2} = \epsilon d (\alpha_2^2 / \alpha_3^2), \quad (9)$$

где $(h_1 - h_2)/\alpha_2 = d$ — толщина кристаллической линзы.

Из формулы (9) видно, что астигматизм кристаллической линзы можно устранить только в случае, если параксиальный луч проходит по линзе параллельно оптической оси линзы ($\alpha_2 = 0$) (толщина линзы d не может быть равной 0). Кроме того, знак астигматизма зависит только от знака двулучепреломления кристалла и не зависит от конфигурации линзы, ее оптической силы и положения предметной точки. Все это приводит к тому, что в оптической системе, кристаллические компоненты которой выполнены из одного и того же материала, астигматизм будет увеличиваться с увеличением количества анизотропных компонентов. Устранение его возможно только в том случае, когда устранен астигматизм каждого компонента. Скомпенсировать астигматизм системы можно применением компонентов из кристаллов с различными знаками анизотропии или введением в систему цилиндрической линзы.

1. Г а л ь п е р н Д. Ю. Геометрическая оптика кристаллов // Труды ГОИ. 1980. Т. 47. Вып. 181.

2. С л ю с а р е в Г. Г. Методы расчета оптических систем. Л., 1969.

Наши юбиляры



ДМИТРИЙ СТЕПАНОВИЧ УМРЕЙКО



Исполнилось 60 лет со дня рождения крупного белорусского ученого в области спектроскопии молекулярных систем, заведующего отделом спектроскопии и люминесценции Научно-исследовательского института прикладных физических проблем им. А. Н. Севченко, доктора физико-математических наук, профессора Дмитрия Степановича Умрейко.

Д. С. Умрейко родился 18 марта 1934 г. в Минске. После окончания в 1956 г. с отличием Белорусского государственного университета началась его научная деятельность под руководством А. Н. Севченко на кафедре физической оптики. После окончания аспирантуры Д. С. Умрейко с 1959 г. работал на кафедре физической оптики, где прошел путь от младшего научного сотрудника до профессора.

В 1962 г. он успешно защищает кандидатскую, а в 1971 г. — докторскую диссертацию. В 1966 г. ему было присвоено ученое звание доцента, а в 1972 г. — профессора кафедры физической оптики.

Д. С. Умрейко является одним из организаторов Научно-исследовательского института прикладных физических проблем, в котором он работает и по сей день. Им было сформировано и успешно развивается важное научное направление — молекулярный спектрально-

структурный анализ координационных соединений тяжелых металлов (на базе урана), имеющий фундаментальное значение для решения задач информатики, автоматизированного поиска структур с наперед заданными свойствами, создания новых перспективных материалов. Значительны успехи Д. С. Умрейко и в разработке новых газодинамических систем управления лазерными пучками, создании высокоэффективных генерирующих твердотельных сред на основе активированных редкими землями кристаллов. Им выполнен большой цикл работ по проблеме новых методов анализа сложных многокомпонентных газовых сред (влагодержащих, агрессивных, высокотемпературных), основанных на создании градиента показателя преломления в исследуемом потоке и измерении пространственных характеристик зондирующего светового луча. Эти методы нашли применение в промышленности, а также при решении экологических проблем и отмечены дипломами, золотыми и серебряными медалями ВДНХ СССР, на международных выставках. За упомянутый цикл работ ученому в 1991 г. была присуждена премия Совета Министров Республики Беларусь.

Д. С. Умрейко проводит большую педагогическую, воспитательную, организационную работу. Его курсы лекций для студентов университета отличаются высоким преподавательским мастерством, глубиной изложения материала. Он активно участвует в ряде Советов университета и института по защите докторских и кандидатских диссертаций, руководит аспирантами и соискателями: им подготовлено 2 доктора и 20 кандидатов наук. По результатам исследований Д. С. Умрейко опубликованы 4 монографии, 3 учебных пособия, 245 статей, получено 45 авторских свидетельств на изобретения.

Д. С. Умрейко внес большой вклад в организацию научных исследований в университете. Он первым возглавил научно-исследовательский сектор университета и руководил им с 1964 по 1971 г., а затем был заместителем директора по научной работе НИИ ПФП (1971—1979 гг.). Как участник партизанского движения в годы Великой Отечественной войны Д. С. Умрейко ведет военно-патриотическую и воспитательную работу. Награжден орденом Отечественной войны II степени, многими медалями. За успехи в научно-исследовательской, научно-организационной и педагогической деятельности в 1971 г. он награжден Почетной грамотой Верховного Совета БССР.

Редколлегия «Вестника БГУ», студенты, аспиранты, сотрудники и преподаватели физического факультета Белорусского университета желают Дмитрию Степановичу крепкого здоровья, долгих лет плодотворной научной и преподавательской работы, бодрости и большого человеческого счастья.

НИКОЛАЙ АНТОНОВИЧ ЛУКАШЕВИЧ

Исполнилось 60 лет со дня рождения доктора физико-математических наук, профессора Николая Антоновича Лукашевича.

Н. А. Лукашевич родился 10 мая 1934 г. в д. Пасиничи Слонимского района Гродненской области. После окончания в 1957 г. Белгосуниверситета поступил в аспирантуру. Его научной работой руководил академик Н. П. Еругин. С 1960 г. Н. А. Лукашевич работал на кафедре дифференциальных уравнений БГУ в должности ассистента. Вся его дальнейшая преподавательская и научная деятельность связана с кафедрой дифференциальных уравнений. В 1962 г. Н. А. Лукашевич успешно защитил кандидатскую диссертацию на тему «Поведение интегральных кривых «в целом» некоторых систем обыкновенных дифференциальных уравнений при наличии особой точки типа «центр», которая явилась одной из первых работ, посвященных качественному интегрированию двумерных полиномиальных динамических систем при наличии особой точки типа «центр». В 1963 г. он избирается на должность старшего преподавателя, а затем — на должность доцента. В 1967 г. ему присваивается звание доцента.



В 1972 г. Н. А. Лукашевич защитил докторскую диссертацию на тему «Некоторые задачи аналитической теории дифференциальных уравнений». В этом же году он возглавил кафедру дифференциальных уравнений, которой руководил в течение 21 года. В 1974 г. ему присваивается звание профессора.

Н. А. Лукашевич опубликовал более 80 научных работ (из них 2 монографии). Под его руководством защищена 1 докторская и 31 кандидатская диссертации. Основные направления научной деятельности Н. А. Лукашевича связаны с вопросами качественной теории дифференциальных уравнений (проблемы центра-фокуса, изохронности, вопросы интегрируемости), исследованиями аналитической теории дифференциальных уравнений, в которых рассматриваются проблемы однозначности решений нелинейных систем, определение условий существования и построения специальных классов решений. Н. А. Лукашевичем впервые начато систематическое исследование нелинейных уравнений Пенлеве, которые нашли широкое применение в теоретической и математической физике.

За многолетнюю плодотворную научную и педагогическую деятельность Н. А. Лукашевич награжден Почетной грамотой Верховного Совета БССР, грамотами Министерства образования республики и ректората БГУ.

Коллектив факультета сердечно поздравляет Николая Антоновича с юбилеем, желает крепкого здоровья, большого личного счастья, успехов в научной и педагогической деятельности.

РЕФЕРАТЫ

УДК 530.145

Комаров Л. И., Солодухин А. М., Цветков И. В. Полуфеноменологическая оценка поляризуемостей многоэлектронных атомов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

В работе предложена оценка реакции атомов на слабые внешние электрические поля, основанная на использовании модели независимых частиц с водородоподобными волновыми функциями для описания атомов. Феноменологический гамильтониан модели независимых частиц построен таким образом, чтобы периодические свойства системы элементов связывались с представлением группы $SO(4,2)$. Конкретные вычисления выполнены с использованием Операторного метода. Получены общие формулы для расчета статической и динамической поляризуемостей атомов тяжелых элементов. Вычислены значения скалярных статических поляризуемостей атомов церия и неодима.

Библиогр. 10 назв., табл. 1.

УДК 535.538.6

Барковский Л. М., Жилко В. В., Лавриненко А. В. Расчет электрооптических призмных модуляторов света для линейных и кольцевых резонаторов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Для падающего под углом Брюстера излучения изучены характеристики электрооптических призмных модуляторов с четырьмя попарно параллельными рабочими гранями из кристаллов KDP, DKDP и ниобата лития при различных температурах и длинах управляемой области. Исследованы характеристики электрооптических модуляторов, действующих одновременно как затвор и как зеркало, поворачивающее излучение в резонаторе на углы 60° и 90° . Рассчитаны зависимости коэффициентов пропускания поляризованных пучков излучения модуляторами из кристаллов KDP и DKDP от управляющего напряжения при различных значениях температур. Изучены спектральные зависимости коэффициентов пропускания.

Библиогр. 10 назв., 4 рис.

УДК 621.039

Дудчик Ю. И., Комаров Ф. Ф., Константинов Я. А. Исследование распространения рентгеновских лучей в планарных волноводах // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Исследовано распространение характеристического излучения молибдена и рения в планарных рентгеновских волноводах. Предложена одна из возможных систем для сканирования объектов пучком рентгеновского излучения.

Библиогр. 8 назв., ил. 3.

УДК 535.37

Гулис И. М., Марковский О. Л., Цвирко В. А. Флуоресценция антрацена в матрицах Шпольского при селективном возбуждении // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Анализируются спектры флуоресценции антрацена в гептане при 77 К для различных частот возбуждения. Обнаружен специфический характер функции распределения молекул по частотам 0—0-перехода, обусловленный существованием двух подансамблей молекул антрацена, соответствующих упорядоченному и неупорядоченному типам внедрения активатора. На основании того, что ширины однородных контуров для обоих типов внедрения близки, делается заключение о сходном характере электрон-фононного взаимодействия активатора с матрицей в упорядоченной и неупорядоченной фазах.

Библиогр. 5 назв., ил. 1.

УДК 53.082.5

Клищенко А. П., Козлов И. Н., Слободянюк А. И. Статистический анализ работы двухканального поляриметра // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Исследовано влияние мультипликативных шумов ФЭУ на погрешность определения степени поляризации люминесценции при импульсном возбуждении. Показано, что флуктуации энергии возбуждающего светового импульса не влияют на погрешность измерения степени поляризации люминесценции. Предложен алгоритм обработки результатов серии измерений.

Библиогр. 3 назв., ил. 1.

УДК 535.372:548

Зажогин А. П., Серафимович А. И., Зажогин А. А. Донорная способность нейтральных лигандов и ее влияние на структурные и спектральные параметры уранилнитратов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Получены аналитические выражения для зависимостей между донорной способностью нейтральных лигандов и спектральными и структурными параметрами уранилнитратов типа $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{S}$. Показано, что при увеличении донорной способности нейтральных лигандов расстояния между ураном и кислородами нитратных групп увеличиваются, а между ураном и кислородами нейтральных лигандов уменьшаются.

Библиогр. 9 назв., ил. 3, табл. 1.

УДК 541.573:549.516

Соколовский Т. Д., Шашков С. Н. Полная энергия и динамика решетки моносulfида кальция // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

В приближении непарного взаимодействия проведены расчеты энергии решетки, фононного спектра и удельной теплоемкости моносulfида кальция.

Библиогр. 9 назв., ил. 4.

УДК 535.322

Виленич Б. Б., Галич Н. Е., Умрейко Д. С. Аналогия между расходимостью светового пучка в турбулентной среде и самодефокусировкой в спутном потоке газа // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Рассмотрен пример аналогии между нелинейной и стохастической рефракцией излучения. Отмечается возможность моделирования тепловой самодефокусировки мощного излучения, распространяющегося по потоку газа или жидкости, посредством дефокусировки светового пучка малой мощности в случайно-неоднородной среде и наоборот.

Библиогр. 4 назв.

УДК 538.913—405

Ревинский А. Ф. Расчет фононного спектра и теплоемкости кремния из первых принципов // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

При помощи метода «вмороженных» фононов на примере кремния рассчитаны из первых принципов частоты нормальных колебаний для двух векторов зоны Бриллюэна. Посредством привязки к полученным частотам определены силовые постоянные для модели «жестких» ионов, которые использованы для вычисления фононного спектра и температурной зависимости теплоемкости кремния.

Библиогр. 13 назв., ил. 3.

УДК 517.925.6

Горбузов В. Н., Гнездовский Ю. Ю. О полиномиальных решениях систем алгебраических дифференциальных уравнений // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Для систем алгебраических обыкновенных дифференциальных уравнений в зависимости от параметров, входящих в их задание, установлены случаи наличия решений в виде полиномов с указанием их степеней.

Библиогр. 15 назв.

УДК 517.95

Артемьева С. М., Кожеро М. В. Многомерные линейные дифференциальные уравнения с функционально-коммутативным оператором // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

В данной работе даются определения слабо и сильно функционально-коммутативного оператора. Для многомерных линейных дифференциальных уравнений с сильно функционально-коммутативным оператором рассматриваются свойства решений при специальных возмущениях.

Библиогр. 5 назв.

УДК 517.983.53

Шилин А. П. К решению в замкнутой форме дискретных уравнений типа свертки с почти стабилизирующимися множителями // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Указан способ решения некоторых дискретных уравнений типа свертки, содержащих множители вида $(-1)^n$.

Библиогр. 7 назв.

УДК 519.62

Б о б к о в В. В., Б о б к о в а Н. А. Об одном классе методов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Предлагается новый класс явных методов численного решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений (в том числе жестких). Методы ориентированы на процесс пошаговой линеаризации автономных систем. В рассматриваемом классе степень аппроксимирующего матричного многочлена (при заданном шаге сетки) является параметром, управляющим вычислительным процессом.

Библиогр. 6 назв.

УДК 517.925

Ч и н ь З а н ь Д а н г (Вьетнам). О частной изохронности высших порядков дифференциальных систем Коши — Римана // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Получены коэффициентные необходимые и достаточные условия частной изохронности голоморфных автономных систем двух обыкновенных дифференциальных уравнений, удовлетворяющих условиям Коши — Римана.

Библиогр. 2 назв.

УДК 519.1

М е л ь н и к о в О. И., К о р н е л ь ю к Г. А., К л и м о в а Л. А. Реализация гиперграфов графами, гомеоморфными звезде // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Рассматриваются необходимые и достаточные условия реализации гиперграфов графами, гомеоморфными звезде. Приводится полиномиальный алгоритм проверки найденных условий.

Библиогр. 12 назв.

УДК 519.233.2

С и н ь к е в и ч Д. В., Т р у ш Н. Н. Вычисление моментов высших порядков агрегированных частот состояний однородной марковской цепи для полиномиальной схемы // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Получена формула для вычисления математического ожидания произведения произвольного числа частот состояний однородной марковской цепи, взятых в одинаковые моменты времени, при условии, что степень каждого множителя — некоторое натуральное число.

Библиогр. 3 назв.

УДК 517.929

Г а о С ю э д у н (КНР). Решение двух кусочно-линейных задач оптимального управления // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Доказаны необходимые и достаточные условия оптимальности опорных управлений в задачах оптимального управления с кусочно-линейным выходом и кусочно-линейным критерием качества.

Библиогр. 1 назв.

УДК 517.977

Г а б а с о в Р., К и р и л л о в а Ф. М. Оптимальная обратная связь по выходу // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Предлагается новая постановка оптимальной обратной связи по выходу, непосредственно обобщающая классическую оптимальную обратную связь по состоянию для детерминированных задач. Описывается метод реализации предложенной обратной связи с помощью оптимальных регуляторов и эстиматоров, для которых ранее авторами был обоснован алгоритм работы в режиме реального времени.

Библиогр. 10 назв.

УДК 519.853.32

П о к а т а е в А. В., Ч е м и с о в а Т. В. Алгоритм решения задачи геометрического программирования с простыми ограничениями на переменные // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Предлагается комбинированный алгоритм для решения сепарабельной задачи геометрического программирования с простыми ограничениями на переменные. Алгоритм

состоит из итераций прямого и двойственного типов, основанных на новом принципе выбора подходящего направления.

Библиогр. 5 назв.

УДК 535.31

Ермаков В. В., Сашкевич И. В. Первичный астигматизм оптических систем, содержащих анизотропные материалы // Вестн. Белорус. ун-та. Сер. 1. 1994. № 2.

Рассматривается оптическая система, содержащая анизотропные компоненты. Показано, что такие компоненты вносят первичный астигматизм для осевых точек предмета. Рассчитана величина этого астигматизма. Предложены способы его компенсации.

Библиогр. 2 назв., ил. 1.

CONTENTS

PHYSICS

<i>Komarov L. I., Solodukhin A. M., Tsvetkov I. V.</i> Semiphenomenological estimation of the many-electron atom polarizability	3
<i>Barkovsky L. M., Zhilko V. V., Lavrinenko A. V.</i> Calculation of electrooptic prism modulators for linear and ring resonators	8
<i>Dudchik Yu. I., Komarov F. F., Konstantinov Ya. A.</i> Investigation of the X-ray propagation in the planar waveguides	13
<i>Gulis I. M., Markovsky O. L., Tswirko V. A.</i> Anthracene fluorescence in spolski matrices due to selective excitation	18
<i>Klischenko A. P., Kozlov I. N., Slobodyanyuk A. I.</i> Statistical analysis of the operation of a two-channel polarimeter	21
<i>Zazhigin A. P., Serafimovich A. I., Zazhigin A. A.</i> Donor ability of neutral ligands and its effect on structural and spectral parameters of uranyl nitrates	24
<i>Sokolovski T. D., Shashkov S. N.</i> The total energy and lattice dynamics of calcium monosulphide	27
<i>Vilenchits B. B., Galich N. E., Umreiko D. S.</i> Analogy between the light-beam divergence in a turbulent medium and selffocusing in the cocurrent gas flow	30
<i>Revinsky A. F.</i> First-principles calculation of the phonon spectra and heat capacity of silicon	33

MATHEMATICS, MECHANICS

<i>Gorbuzov V. N., Gnezdovsky Yu. Yu.</i> About polynomial solutions of the systems of algebraic differential equations	37
<i>Artemeva S. M., Kojero M. V.</i> Many-dimensional linear differential equation with functional-commutative operator	40
<i>Shilin A. P.</i> On the solution in the closed form of the discrete equations of convolution type with the almost stable multipliers	44
<i>Bobkov V. V., Bobkova N. A.</i> On some class of numerical methods for systems of ordinary differential equations	47
<i>Chin Zan Dang.</i> On a particular isochronism of higher orders of Cohy — Reman's differential systems	50
<i>Melnikov O. I., Korneluk G. A., Klimova L. A.</i> The realization of hypergraphs by graphs which are gomeomorfic to the star	53
<i>Sinkevich D. V., Trush N. N.</i> The calculation of higher order moments of aggregative state frequency of homogeneous Markovian chain for polynomial scheme	55
<i>Gao Suedun.</i> The solution of two piecewise linear problems of optimal control	61
<i>Gabasov R., Kirillova F. M.</i> Optimal Output feedback	64
<i>Pokataev A. V., Tchemisova T. V.</i> Algorithm of solving the geometric programming problem with box constraints	68

BRIEF COMMUNICATIONS

<i>Ermakov V. V., Stashkevitch I. V.</i> The primary astigmatism of the optical systems containing anisotropic materials	74
--	----

OUR JUBILEE

<i>Dmitri Stepanovich Umreiko</i>	76
<i>Nikolai Antonovich Lukashevich</i>	77