

ISSN 0321-0367



ВЕСТНИК

Белорусского государственного
университета имени В. И. Ленина

СЕРИЯ I

ФИЗИКА

МАТЕМАТИКА

МЕХАНИКА

3
—
1981

СОДЕРЖАНИЕ

ФИЗИКА

<i>Воропай Е. С., Гайсенко В. А., Саечников В. А., Саржевский А. М.</i> Влияние ориентационной дипольной релаксации на спектрально-люминесцентные свойства растворов сложных молекул в условиях взаимодействия с лазерным излучением	3
<i>Зажогин А. П., Комяк А. И., Титков Е. Ф.</i> Природа «мультиплетной» структуры низкотемпературных спектров кристаллов соединений уранила	10
<i>Барковский Е. В., Прокошина Н. А., Ховратович Н. Н., Черенкевич С. Н.</i> Спектрально-люминесцентные характеристики тромбина	15
<i>Зятков И. П., Пищевич Г. А., Сагайдак Д. И.</i> О корреляции спектральных и технологических характеристик пероксидов ацилов	18
<i>Слепяк Г. Я., Фурса Е. Я., Шушкевич С. С.</i> Топография магнитно-резонансных характеристик больших плоских образцов	22
<i>Карась В. И., Кольченко Т. И., Ломако В. М., Новоселов А. М.</i> Прямые экспериментальные доказательства подвижности первичных радиационных дефектов в GaAs	30
<i>Хапалюк А. П.</i> Полное резонансное поглощение электромагнитных волн в однородном шаре	32
<i>Лукашевич М. Г., Стельмах В. Ф.</i> Особенности низкотемпературного приращенного пробоя в эпитаксиальном арсениде галлия	37

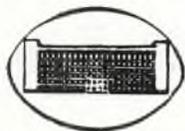
МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

<i>Прусов И. А., Василевич Ю. В.</i> Об одном варианте представления общих формул теории упругости ортотропного тела	39
<i>Медведев Г. А.</i> Адаптивное оценивание при зависимых выборках	46
<i>Зверович Э. И.</i> Задача Карлемана на римановой поверхности с краем и отображение круговых многоугольников	50
<i>Габасов Р.</i> Вопросы конструктивной теории оптимального управления	56
<i>Бобков В. В.</i> Численные методы с улучшенными свойствами согласованности дифференциальной и разностной задач	61
<i>Бондаренко А. А.</i> Алгебра и алгебраическая геометрия в работах математиков БГУ имени В. И. Ленина	65
<i>Батурина Л. Н., Лепешинский Н. А.</i> Задача о максимальном потоке при изменениях параметров сети	70

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

Федор Иванович Федоров (К 70-летию со дня рождения)	73
---	----

К 60-летию
БЕЛОРУССКОГО
ордена Трудового Красного Знамени
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
имени В. И. ЛЕНИНА



ВЕСТНИК

*Белорусского государственного
университета имени В. И. Ленина*

НАУЧНО-ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Издается с 1969 года
один раз в четыре месяца

СЕРИЯ I

ФИЗИКА

МАТЕМАТИКА

МЕХАНИКА

№ 3
СЕНТЯБРЬ

Главная редакционная коллегия журнала:

М. Д. ТИВО (*главный редактор*),
П. Н. БАРАНОВСКИЙ (*ответственный секретарь*), В. С. ГРИГОРЬЕВ, Г. П. ДАВИДЮК, В. Г. ИВАШИН, В. Г. РУДЬ
(*зам. главного редактора*), А. М. САРЖЕВСКИЙ, А. Е. СУПРУН, И. Г. ТИЩЕНКО

Редакционная коллегия серии:

А. М. САРЖЕВСКИЙ (*ответственный редактор*),
Ю. С. БОГДАНОВ (*зам. ответственного редактора*), В. И. ВЕДЕРНИКОВ, Е. С. ВОРОПАЙ, Э. И. ЗВЕРОВИЧ, Е. А. ИВАНОВ, [В. В. ИЗОХ], Л. И. КОМАРОВ, А. И. КОМЯК,
Н. А. ЛЕПЕШИНСКИЙ, И. А. ПРУСОВ, В. Ф. СТЕЛЬМАХ,
Б. Ю. ХАНОХ (*ответственный секретарь*), А. Ф. ЧЕРНЯВСКИЙ, С. С. ШУШКЕВИЧ

ВЕСТНИК БЕЛОРУССКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
имени В. И. ЛЕНИНА

Серия I, физ., мат. и мех., 1981, № 3

Редактор *И. П. Стрельченя*
Художественный редактор *Л. Г. Медведова*
Технический редактор и корректор *Г. И. Хмарун*

Сдано в набор 18.06.81. Подписано в печать 15.09.81. АТ 21025. Формат 70×108^{1/16}. Высокая печать. Усл. печ. л. 7,0. Усл. кр.-отт. 7,1. Уч.-изд. л. 7,35. Тираж 1000 экз. Заказ 336.

Издательство Белорусского государственного университета имени В. И. Ленина, 220048, Минск, проспект Машерова, 11.
Адрес редакции: 220080, Минск, Университетский городок, телефон 20-65-42.

Ордена Трудового Красного Знамени типография издательства ЦК КП Белоруссии, 220041, Минск, Ленинский пр., 79.

УДК 535.37

Е. С. ВОРОПАЙ, В. А. ГАЙСЕНOK,
В. А. САЕЧНИКОВ, А. М. САРЖЕВСКИЙ

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИОННОЙ ДИПОЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ НА СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА РАСТВОРОВ СЛОЖНЫХ МОЛЕКУЛ В УСЛОВИЯХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Спектрально-люминесцентные свойства активированных растворов во многом определяются процессами межмолекулярной релаксации (ММР), развивающимися вслед за актами возбуждения и дезактивизации примесных молекул. Спектроскопические проявления ММР при возбуждении растворов излучением малой интенсивности изучены достаточно полно [1, 2]. Исследования же этих особенностей ММР при взаимодействии с интенсивным лазерным излучением начались лишь в последние годы. В работах [2—6] показано, что, варьируя интенсивность, длительность и спектральный состав воздействующего на вещество излучения, можно управлять процессами ММР, а следовательно, и оптическими свойствами раствора. Это указывает на существование нового круга нелинейных фотофизических явлений. Настоящая работа посвящена дальнейшему развитию теоретического описания этих явлений и их экспериментальному исследованию.

Достаточно строгий и последовательный расчет спектрально-люминесцентных характеристик растворов может быть выполнен с помощью уравнений баланса и осцилляторной модели примесных молекул. При этом необходимо учитывать статистическое распределение молекул активатора по степени взаимодействия с окружением. В общем случае такое распределение связано как с флуктуационными различиями ближайшего окружения молекул, так и с релаксацией окружения после акта возбуждения или дезактивации молекулы. Это приводит к необходимости рассматривать раствор в виде статистического набора «элементарных ячеек» [7, 8]. Каждая ячейка имеет индивидуальную конфигурацию расположения молекул растворителя, определяющую расстояние между уровнями ячейки и вероятности переходов между ними, что и проявляется в неоднородном уширении спектров поглощения и излучения раствора в целом. Для анализа процессов поглощения и излучения света в «элементарной ячейке» воспользуемся четырехуровневой схемой [1, 2],

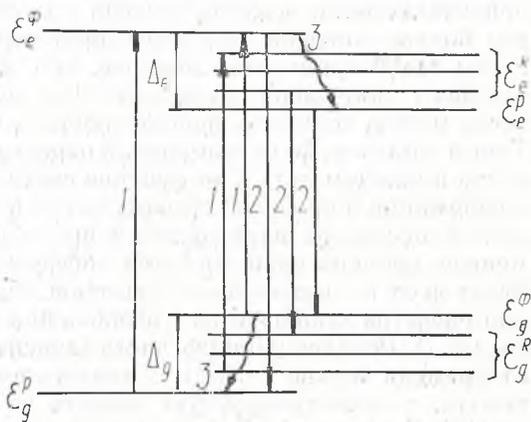


Рис. 1. Четырехуровневая схема. Возможные переходы с поглощением (1) и излучением (2) света. Релаксация окружения (3)

изображенной на рис. 1. Отметим, что каждая «элементарная ячейка» имеет собственные параметры четырехуровневой схемы, т. е. свое значение времени жизни в основном τ_g и возбужденном τ_e состояниях, постоянную времени релаксации τ_R и величину релаксационных сдвигов электронных состояний Δ_g и Δ_e . В зависимости от типа «ячейки» релаксация может сопровождаться как уменьшением (релаксация вниз), так и увеличением (релаксация вверх) [9, 10] частоты 0—0 перехода.

В общем случае переходы между электронными состояниями конкурируют с установлением равновесия в «элементарной ячейке», и за счет ММР для каждого типа ячеек будет возникать определенное распределение молекул по релаксационным подуровням основного и возбужденного состояний. Это распределение может быть описано посредством функций распределения по значениям какой-либо выделенной частоты ν' (например, частоты 0—0 перехода в спектре поглощения или излучения) для невозбужденных $\rho_g(\nu')$ и возбужденных $\rho_e(\nu')$ молекул. Тогда уравнения баланса для данного типа ячеек можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{dn_e}{dt} = & D\Delta n_e - n_e [\tau_e^{-1} + \int \rho_e(\nu', t) d\nu' \int b_{eg}(\Omega, \nu', \nu, t) U_e(\nu) d\nu] + \\ & + n_g \int \rho_g(\nu', t) d\nu' \int b_{ge}(\Omega, \nu', \nu, t) U_g(\nu) d\nu, \\ n_e(\Omega) + n_g(\Omega) = & \frac{1}{8\pi^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $n_e(\Omega)$ и $n_g(\Omega)$ — плотность населенностей возбужденных и невозбужденных молекул, ориентированных в направлении Ω ; D — коэффициент вращательной диффузии; Δ — угловая часть оператора Лапласа, $b_{eg}(\Omega, \nu', \nu, t)$ и $b_{ge}(\Omega, \nu', \nu, t)$ — спектральные плотности дифференциальных коэффициентов Эйнштейна для вынужденного излучения и поглощения в заданной ячейке. Для общности полагаем, что вынужденные переходы возникают под действием двух потоков радиации, один из которых со спектральной плотностью $U_g(\nu)$ приводит преимущественно к возбуждению молекул, а другой, с плотностью $U_e(\nu)$ — к вынужденному излучению (световому тушению). Зная плотности населенностей состояний ячеек, по известной методике [11], можно рассчитать спектрально-люминесцентные характеристики всех типов центров. Для определения наблюдаемых на опыте величин далее необходимо провести усреднение по начальному состоянию всех «элементарных ячеек».

Временная зависимость входящих в (1) коэффициентов Эйнштейна обусловлена двумя факторами: флуктуациями окружения и ММР. Первый процесс флуктуационный, другой — упорядоченный. Раздельное рассмотрение флуктуаций окружения и ММР является приближенным. Возможность такого приближения обосновывается тем, что энергия ориентационного взаимодействия молекул с окружением в несколько раз больше энергии теплового движения молекул. Следовательно, процессы ММР происходят быстрее, чем флуктуационные нарушения ближайшего окружения молекулы. Для оценок скорости последнего процесса можно положить равной скорости вращательной диффузии, т. е. D . Таким образом, флуктуационной перестройкой ячейки можно пренебречь, когда в каждом акте «поглощение света — дезактивация» не содержится информации о предшествующих актах и характерные масштабы времени для процессов, развивающихся в пределах одной «элементарной ячейки», меньше времени вращательной диффузии D^{-1} . Смысл этих утверждений будет ясен из дальнейших примеров. Основная трудность при выполнении расчетов заключается в вычислении функции распределения $\rho_g(\nu', t)$ и $\rho_e(\nu', t)$. Релаксационную часть зависимости коэффициентов Эйнштейна от времени можно связать с изменением со временем частоты 0—0 перехода, а флуктуационную описать в рамках стохастического подхода [12]. Если скорость флуктуаций окружения намного больше вероятностей переходов с поглощением или излучением света, то в уравнениях баланса соответствующие коэффициенты Эйнштейна можно рассматривать как усредненные по флуктуационному движению молекул.

Спектроскопические проявления ММР определяются соотношениями между вероятностями спонтанных и вынужденных переходов, скоростью релаксации и флуктуационного нарушения окружения молекул. Рассмотрим некоторые частные случаи.

1. Полная релаксация в основном и возбужденном состоянии ($\tau_R \ll \tau_e, \tau_g$). Этот случай хорошо изучен в линейной спектроскопии [1, 2] и соответствует маловязким растворам. Независимо от значений $U_g(\nu)$ и $U_e(\nu)$, определяющих время τ_g и τ_e , переходы с поглощением и излучением происходят из равновесных состояний e_g^p и e_e^p (см. рис. 1). При использовании уравнений баланса вероятности переходов здесь можно рассматривать как усредненные по флуктуационному движению окружения, если только не ставится задача изучения поведения системы на временных интервалах порядка D^{-1} .

2. Полная релаксация в основном и частичная в возбужденном состоянии ($\tau_e \sim \tau_R \ll \tau_g$). Излучение в этом случае происходит в совокупности релаксационных уровней возбужденного состояния e_e^R (см. рис. 1). В линейной спектроскопии такая ситуация реализуется для достаточно вязких растворов за счет конкуренции процессов ММР и дезактивации возбуждения. При этом, по сравнению с маловязким раствором, спектр люминесценции сдвигается в коротковолновую область и уширяется, наблюдается зависимость степени поляризации по спектру люминесценции, обусловленная броуновским вращением молекул [1].

В условиях светового тушения люминесценции конкуренция дезактивации возбуждения и ММР может проявляться и для маловязких растворов [5]. По мере увеличения интенсивности тушащего излучения здесь также следует ожидать развития коротковолнового сдвига спектра люминесценции [13] и спектральной зависимости степени поляризации по полосе испускания [5]. Последнее обусловлено наложением развивающегося во времени релаксационного сдвига спектра и деполяризации или реполяризации при световом тушении [14, 15].

При расчетах здесь удобнее пользоваться распределением не по частотам ν' , а по времени t' пребывания молекулы в возбужденном состоянии. Искомая функция $\rho_e(t')$ находится из уравнений

$$\rho_e(t') = \frac{dW_e(t')}{dt'},$$

$$\frac{dW_e(t')}{dt'} = -W_e(t') \{ \tau_0^{-1} + \int b_{eg}(\Omega, \nu, t') U(\nu) d\nu \}, \quad (2)$$

$$W(0) = 1,$$

где τ_0 — время спонтанной дезактивации. Флуктуационными изменениями коэффициента Эйнштейна в этом случае можно пренебречь.

На рис. 2 приведены некоторые результаты численных расчетов спектрально-люминесцентных характеристик модельной системы, близкой по свойствам к спиртовым растворам производных фталимида при различных параметрах светового тушения $S = \tau_e \int B_{eg}(\nu, \infty) U(\nu) d\nu$, где $B_{eg}(\nu, \infty)$ — значение интегрального коэффициента Эйнштейна после завершения релаксации ($t' = \infty$). Экспериментальные спектральные зависимости степени поляризации изображены на рис. 3. Как видно, наблюдается качественное соответствие результатов теории для случая релаксации вниз и эксперимента. Количественного соответствия в данном случае ожидать трудно, так как расчеты (см. рис. 2) проводились для стационарного случая и не учитывали броуновского вращения молекул и флуктуационного уширения уровней спектра излучения. Последний фактор может быть особенно существенным. Известно [9, 10], что центры, ответственные за поглощение в наиболее длинноволновой области спектра, могут испытывать релаксацию «вверх», сопровождающуюся коротковолновым смещением спектра излучения. Как видно из сравнения результатов расчетов, показанных на рис. 2, характер наблюдающихся законо-

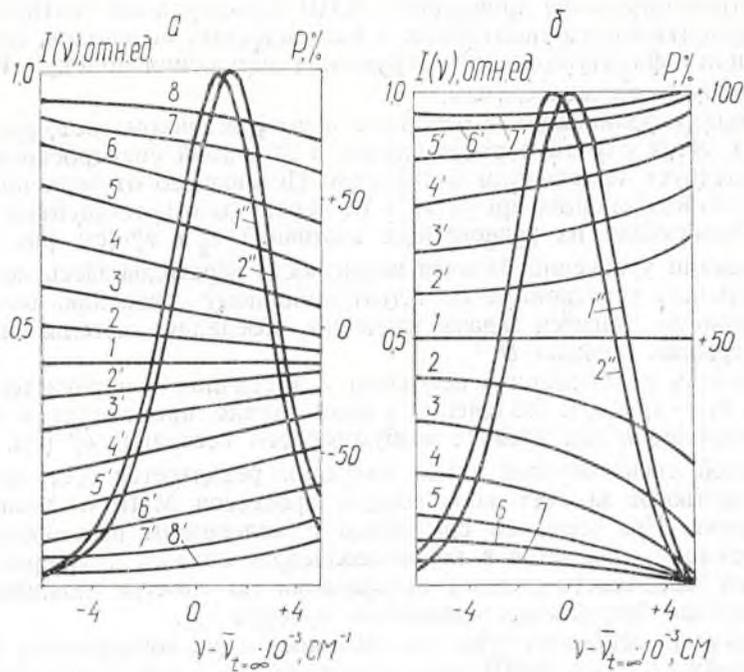


Рис. 2. Зависимости степени поляризации от частоты регистрации люминесценции (1—8, 2'—8') и спектры люминесценции (1'', 2'') при взаимно перпендикулярном (1—8, 1'', 2'') и параллельном (2'—8', 1'') направлении векторов поляризации потоков $U_g(v)$ и $U_e(v)$, рассчитанные при $\lg S = -\infty$ (1, 1''); 0 (2, 2'); 0,5 (3, 3'); 1 (4, 4'); 1,5 (5, 5'); 2 (6, 6'); 2,5 (7, 7'); 3 (8, 8', 2''); $\Delta_e = +1500$ (а), -1500 (б) см^{-1}

мерностей при релаксации «вверх» и «вниз» существенно различается. По этой причине возбуждение даже небольшого числа центров, отвечающих за длинноволновое поглощение, может влиять на результаты эксперимента. В этой связи отметим, что, возбуждая люминесценцию в далекой антистоксовой области длинноволновой полосы поглощения и используя интенсивное световое тушение, можно, по-видимому, наблюдать коротковолновое смещение спектра люминесценции даже при использовании возбуждающих импульсов пикосекундной длительности. Для этого нужно настолько уменьшить время жизни в возбужденном состоянии, чтобы исключить флуктуационную перестройку уровней.

3. Полная релаксация в возбужденном и частичная — в основном состоянии ($\tau_g \sim \tau_R \ll \tau_e$). Этот случай можно реализовать только методами нелинейной спектроскопии в маловязких растворах за счет большого значения вероятности поглощения света. Его математическое описание аналогично предыдущему. Увеличение плотности возбуждающей радиации должно приводить к красному смещению спектра поглощения и спектральной зависимости дихроизма поглощения из основного состояния. Экспериментально эти эффекты еще не изучались.

4. Частичная релаксация в основном и возбужденном состоянии ($\tau_g \sim \tau_e \sim \tau_R$). В этом случае большинство переходов с поглощением и излучением происходит с неравновесных уровней e_g^R и e_e^R (см. рис. 1). В работах [3, 4, 6] показано, что при этом может наблюдаться новое фотофизическое явление вынужденной (ступенчатой) релаксации, суть которого заключается в постепенной релаксации окружения в данной ячейке к состоянию равновесия с возбужденной молекулой (рис. 4), развивающейся в течение нескольких последовательных актов «возбужде-

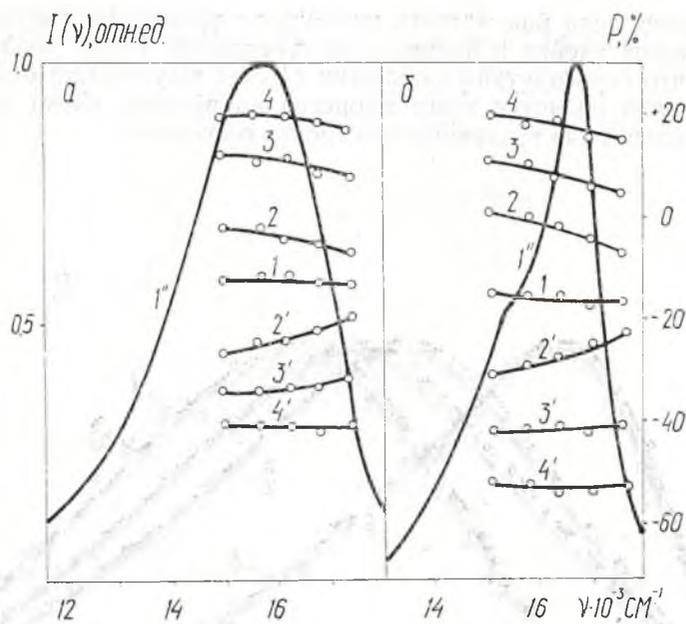


Рис. 3. Зависимости степени поляризации от частоты регистрации люминесценции, измеренные экспериментально для 3,6 ТМДАНМФ (а) при $U=0$ (1, 1'); 1 (2, 2'); 10 (3, 3'); 30 (4, 4') МВт/см², для РС (б) при $U=0$ (1, 1'); 2 (2, 2'); 20 (3, 3'); 60 (4, 4') МВт/см²

ние — дезактивация» молекулы. При этом следует ожидать длинноволновый сдвиг спектров люминесценции и поглощения, спектральную неоднородность дихроизма поглощения и поляризации люминесценции. Подчеркнем, что наведенные светом спектральные особенности должны сохраняться и после выключения возбуждения в течение времени порядка τ^R . Таким образом, можно получить анизотропное распределение определенных типов поглощающих центров даже при отсутствии заметного заселения возбужденных состояний. При теоретическом описании вынужденной ММР нужно учитывать, что вид функций $\rho_g(\nu')$, $\rho_e(\nu')$ определяется не только вероятностями переходов и параметрами релаксации, но и предысторией «элементарной ячейки». Такую «предысторию»

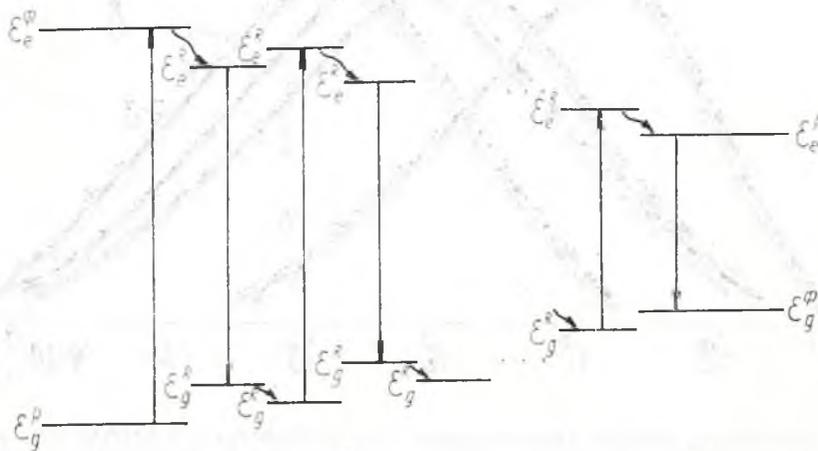


Рис. 4. Развитие во времени процесса ступенчатой релаксации

можно описать, если рассмотреть возможные временные картины поведения отдельной ячейки и провести их усреднение. Кроме того, следует учитывать, что ступенчатая релаксация за счет флуктуаций будет нарушаться, так что развитие этого процесса во времени будет ограничиваться длительностью тепловой перестройки окружения.

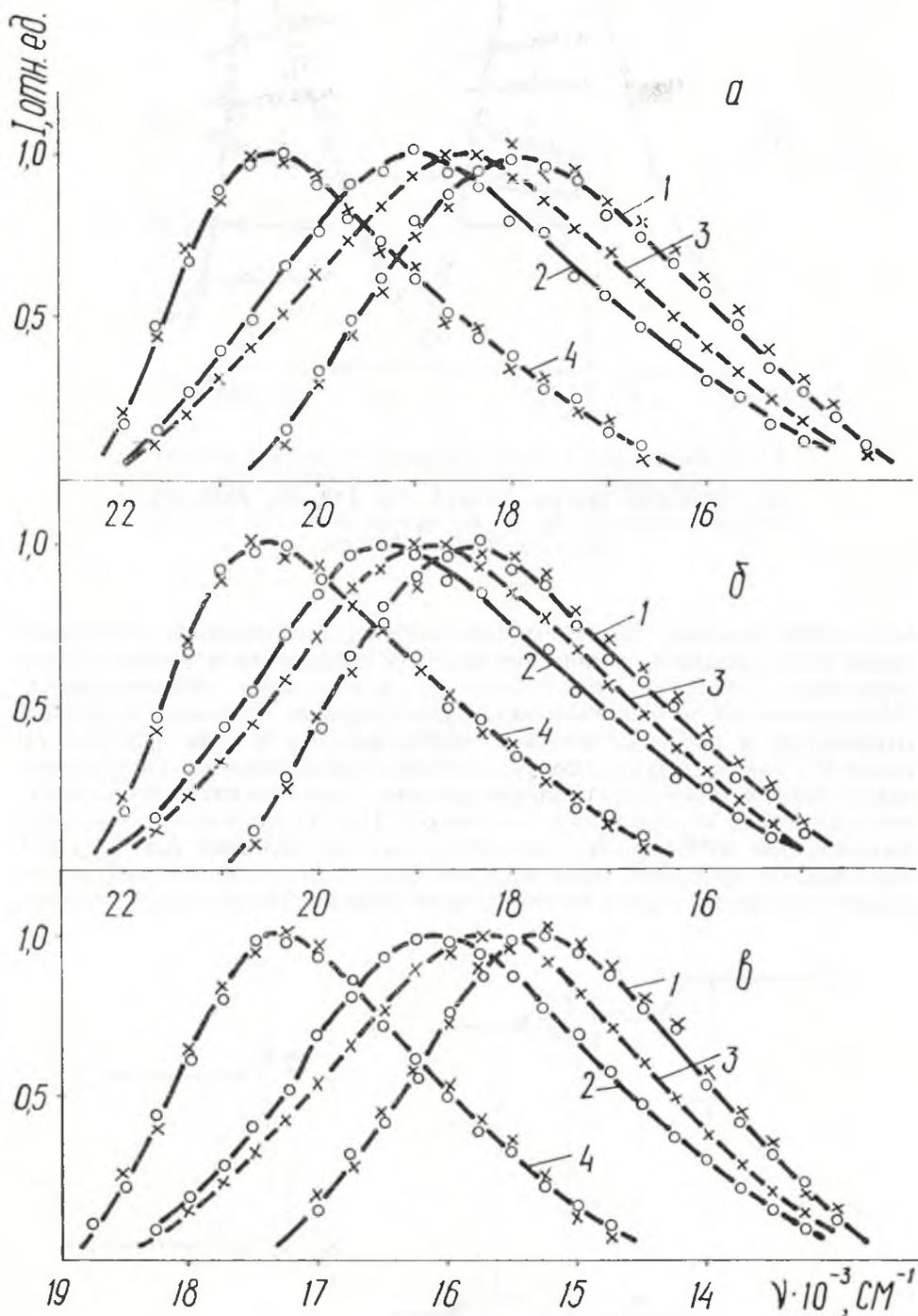


Рис. 5. Зависимость спектров люминесценции для 4АНМФ (а) и 36ТМДАНМФ (б) в глицерине и 4АНМФ в этаноле (в) от плотности мощности $U=3,5 \cdot 10^7$ (х), 10^4 (о) Вт/см² и температуры $t=+20$ (а, 1, б, 1, в, 1); -10 (а, 2, 3; в, 2, 3); -70 (а, 4; б, 2, 3; в, 4); -140 (б, 4) °С

Практическая реализация этого подхода наталкивается пока на значительные трудности. В связи с этим представляет интерес реализация более простых модельных расчетов, позволяющих производить оценки наблюдаемых эффектов. Такие расчеты выполнены в работах [3, 4, 6] на основе осцилляторной модели релаксации. Отметим, что с точки зрения представлений, развиваемых в настоящей работе, они нуждаются в уточнении, связанном с необходимостью учета нарушения ступенчатой релаксации флукуационной перестройкой ячейки.

С целью проверки изложенных представлений о ступенчатой релаксации нами исследованы растворы некоторых производных фталимида. Изучались 4-амино-N-метилфталимид (4АНМФ), 3,6-тетраметилдиаминно-N-метилфталимид (3,6 ТМДАНМФ). Выбор объектов обусловлен большой полярностью этих соединений, а следовательно, и значительной энергией ориентационного взаимодействия с растворителем. В качестве растворителя использовались глицерин, этанол и толуол. Возбуждение осуществлялось второй гармоникой излучения рубинового (для 4АНМФ) и неодимового (для 3,6 ТМДАНМФ) лазеров. Регистрация спектров люминесценции проводилась по фотоэлектрической методике [5]. Максимальная плотность мощности возбуждающего излучения достигала 35 Мвт/см^2 и изменялась с помощью стеклянных светофильтров. Концентрация исследуемых веществ не превышала $5 \cdot 10^{-6} \text{ М}$, кроме того, регистрация осуществлялась под углом приблизительно в 45° , поэтому влияние эффектов перепоглощения было незначительно. Время ориентационной релаксации τ_R варьировалось изменением температуры раствора.

Результаты измерений представлены на рис. 5. Видно, что в определенной области температур наблюдается длинноволновый сдвиг спектра флуоресценции по мере увеличения мощности излучения (500 см^{-1} для 4 АНМФ) (см. рис. 5, а, б, в, кривые 2, 3). Эти результаты могут быть объяснены только проявлением вынужденной релаксации. При более высоких ($\tau_R \ll \tau_e, \tau_g$) и низких температурах заметных изменений в спектрах флуоресценции в условиях нашего эксперимента не наблюдалось.

Величина сдвига спектра люминесценции, как следует из рис. 5, существенно зависит от растворителей, что объясняется их различной полярностью. В толуоле (неполярный растворитель) сдвиг спектров по мере увеличения мощности практически не проявляется при любой температуре.

Таким образом, спектроскопические проявления ММР при облучении растворов интенсивным излучением весьма многообразны и открывают новые возможности для изучения поведения молекул и управления их оптическими свойствами.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахшиев Н. Т. Спектроскопия межмолекулярных взаимодействий.— Л., 1972.
2. Бахшиев Н. Т.— Труды ГОИ, 1979, т. 45, с. 3.
3. Гигин О. П., Бахшиев Н. Т.— Вестник ЛГУ. Сер. физ.-мат., 1978, № 16, с. 141.
4. Гирин О. П.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1978, т. 42, с. 550.
5. Бутько А. И., Воропай Е. С., Желнеревич И. И., Саечников В. А., Саржевский А. М.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1978, т. 42, с. 626.
6. Бахшиев Н. Т., Воропай Е. С., Гайсенко В. А. и др. Лазеры на основе сложных органических соединений и их применение: Тез. 3 Всесоюзной конференции.— Ужгород, 1980, с. 236.
7. Рубинов А. И., Томин В. И.— Оптика и спектр., 1970, т. 29, с. 1082.
8. Рубинов А. И., Томин В. И.— Оптика и спектр., 1972, т. 32, с. 424.
9. Немкович Н. А., Мацейко В. И., Рубинов А. Н., Томин В. И.— Письма в ЖЭТФ, 1979, т. 29, с. 780.
10. Коява В. Т., Попечниц В. И. Материалы конференции молодых ученых и специалистов.— Минск, 1980, с. 52.
11. Степанов Б. И., Грибковский В. П. Введение в теорию люминесценции.— Минск, 1963, с. 443.
12. Мазуренко Ю. Т.— Оптика и спектр., 1980, т. 48, с. 704.
13. Аристов А. В., Бахшиев Н. Т., Кузин В. А., Питерская И. В.— Оптика и спектр., 1971, т. 30, с. 143.

14. Мазуренко Ю. Т.— Оптика и спектр., 1973, т. 35, с. 234.
15. Буров Л. И., Саржевский А. М., Севченко А. Н.— ЖПС, 1975, т. 23, с. 64.

Кафедра общей физики, лаборатория
спектроскопии НИИ ПФП им. А. Н. Севченко

УДК 546.791.6+535.343

А. П. ЗАЖОГИН, А. И. КОМЯК, Е. Ф. ТИТКОВ

ПРИРОДА «МУЛЬТИПЛЕТНОЙ» СТРУКТУРЫ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ СПЕКТРОВ КРИСТАЛЛОВ СОЕДИНЕНИЙ УРАНИЛА

Спектры люминесценции и поглощения кристаллов ураниловых соединений, полученные при температуре жидкого гелия, характеризуются набором большого числа довольно узких линий $\Delta\nu = (5-10 \text{ см}^{-1})$, отстоящих друг от друга на расстоянии $10-20 \text{ см}^{-1}$. Повторяющиеся в группе линии по своему виду подобны мультиплетам (дублетам, триплетам) в атомных спектрах. Подобная картина наиболее отчетливо прослеживается вблизи чисто электронного перехода и его повторений с частотой полносимметричного колебания иона уранила. Существует несколько подходов к объяснению «мультиплетной» структуры спектров вблизи 0—0 перехода. Наиболее часто появление дублетов и триплетов в спектрах объясняют с точки зрения резонансного взаимодействия неодинаково ориентированных молекул в элементарной ячейке [1, 2] или проявлением активных колебаний кристаллической решетки [3]. Подробный анализ спектров люминесценции и поглощения показывает, что указанная интерпретация не исчерпывает всего многообразия «мультиплетной» структуры. Приходится допустить, что отдельные линии «мультиплетов» могут принадлежать различным пространственно разделенным центрам свечения иона уранила в кристалле, на что указывалось в работах [4—6]. Однако природа центров до настоящего времени оставалась невыясненной.

Для уточнения характерных черт структуры электронно-колебательных спектров рассмотрим в качестве примера начальные участки спектров люминесценции и поглощения кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ при 4,2 К (рис. 1). Так как спектры поглощения и люминесценции перекрываются, для более наглядного сравнения они размещены друг под другом: сверху спектр люминесценции, внизу — поглощения. Как видно из рисунка, имеется большое число линий, частоты которых совпадают в обоих спектрах, а интенсивности могут существенно различаться.

Если принять, что все резонансно совпадающие линии являются линиями чисто электронных переходов различных центров, можно легко обнаружить в спектрах комбинирующие с ними частоты валентных колебаний уранила (табл. 1). Как показал анализ полученных данных, практически для всех серий, характеризующихся заметной интенсивностью, наблюдаются комбинации почти одинаковых по величине частот симметричного и антисимметричного колебаний иона уранила. Это позволяет предположить, что в кристалле имеются различные поглощающие центры, колебательные частоты которых одинаковы, а энергии возбуждения слегка различаются. В этом случае в спектре люминесценции будут наблюдаться серии линий, сдвинутых друг относительно друга и отвечающих возбуждению таких центров. А так как колебательные частоты иона уранила, определенные из различных серий, почти совпадают друг с другом, приходится допустить, что линии серий принадлежат пространственно разделенным излучающим центрам основного вещества. В таком случае причиной многообразия серий и изменчивости спектра могут быть локальные различия кристаллического поля, в котором находится излучающий центр. Источниками локальных различий кристаллического

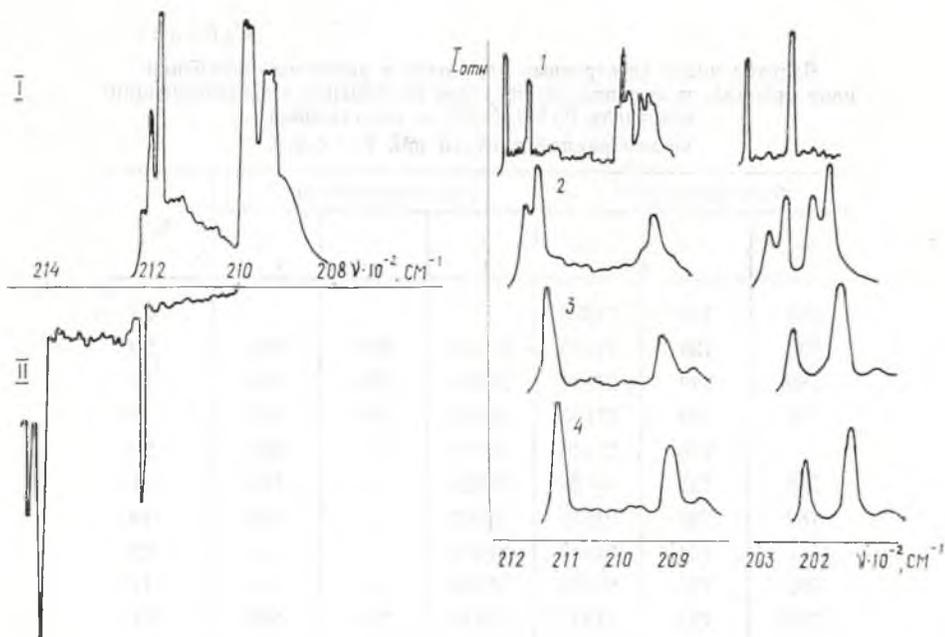


Рис. 1. Начальные участки спектров люминесценции (I) и поглощения (II) кристалла $\text{RbU}_2(\text{NO}_3)_3$ при 4,2 К

Рис. 2. Спектры люминесценции твердых растворов при 4,2 К:

1 — образец с естественной концентрацией примеси; 2, 3, 4 — образцы с концентрацией примеси 10, 30, 40%

поля могут служить различного вида дефекты [7], из которых наиболее важными, по нашему мнению, являются химические и структурные. Под химическими дефектами мы понимаем отклонения от правильной структуры идеального кристалла, связанные с влиянием примесей, под структурными — дефекты, вызванные собственной радиоактивностью ураниловых соединений и возникающие как во время роста, так и во время хранения.

Для проверки предположения о влиянии химических примесей на образование указанных центров мы проанализировали возможность вхождения примесных катионов в кристаллическую решетку $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ при выращивании образцов. Предварительный выбор вида примеси определялся наличием ее в используемых препаратах [8]. Проведенный анализ показал, что катионы цезия и калия, концентрация которых в исходных препаратах может быть значительной [8], а также катионы аммония, образование которых возможно при определенных условиях из нитратов в самом растворе [9], могут изоморфно замещать катион рубидия в кристаллической решетке.

Проведенные исследования [10] подтвердили возможность образования наблюдаемых центров под влиянием примесных катионов.

Спектроскопические свойства центров свечения, образующихся при введении изоморфной примеси в кристалл-растворитель, более подробно исследованы нами по спектрам люминесценции и возбуждения смешанных твердых растворов (СТР) на основе $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ и $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ в широком диапазоне изменений концентраций компонент. Анализ спектров показал, что положение наиболее коротковолновой полосы в спектрах СТР $(\text{Rb}, \text{Cs}^*)\text{UO}_2(\text{NO}_3)_3$ и СТР $(\text{Cs}, \text{Rb}^*)\text{UO}_2(\text{NO}_3)_3$ изменяется пропорционально изменению концентрации примеси (звездочкой обозначена вводимая примесь).

Полученные значения частот максимумов коротковолновых полос из спектров люминесценции и возбуждения исследованных СТР при 77 К приведены на рис. 3 (прямые 1 и 2 соответственно). Видно, что при вве-

Таблица 1

Частоты чисто электронных переходов и валентных колебаний иона уранила, полученные из спектров поглощения и люминесценции кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ с естественной концентрацией примеси при $T = 4,2 \text{ K}$

Поглощение, см^{-1}			Люминесценция, см^{-1}			$\Delta \nu$
ν_3	ν_1	ν_0	ν_0	ν_1	ν_3	
788	740	21228				-23
790	738	21205	21205	891	963	20
788	742	21186	21186	892	963	19
787	740	21165	21165	892	965	19
—	736	21146	21147	—	964	20
788	737	21126	21126	—	962	21
788	735	21112	21107	—	965	19
—	734	21083	21085	—	—	22
792	739	21065	21068	—	—	17
792	742	21047	21047	889	963	21

Примечание: $\Delta \nu$ — разность между соседними частотами 0—0 переходов в спектре люминесценции.

дении примеси $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ в кристалл $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ спектры смещаются в длинноволновую сторону, а примеси $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ в кристалл $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ — в противоположную, коротковолновую сторону. Направление и величина смещения полос в спектрах хорошо согласуются с расположением рубидия в ряду $\text{Cs}^+ \rightarrow \text{Rb}^+ \approx \text{NH}_4^+ \rightarrow \text{K}^+$, соответствующем росту поляризующей способности катионов щелочных металлов и аммония. Следует отметить, что среднее расстояние между соседними значениями частот центров в спектре люминесценции кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ с естественной концентрацией примеси, равное $19\text{--}20 \text{ см}^{-1}$ (см. табл. 1), совпадает с расстоянием между соседними точками на прямой 1, взятыми через 9% изменения концентрации примеси $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$. Установленная закономерность свидетельствует о том, что центры свечения, проявляющиеся в спектрах люминесценции и поглощения кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ с естественной концентрацией примеси при 4,2 К, обусловлены влиянием примесных молекул $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ на молекулы кристалла-растворителя $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$. Подтверждением этому является также то, что частоты чисто электронных линий указанных центров свечения хорошо укладываются на прямую 3 (см. рис. 3), расположенную выше прямой 1 на величину $\Delta E(T) = 11 \text{ см}^{-1}$, характеризующую смещение спектра при понижении температуры от 77 до 4,2 К. Аналогично построена прямая 4 для примесных центров $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ в спектре кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$.

Наблюдаемые изменения в электронных спектрах кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ с примесью молекул $\text{CsUO}_2(\text{NO}_3)_3$ можно объяснить, предположив, что в кристалле образуются группы (кластеры), состоящие из примесных молекул и возмущенных примесью молекул кристалла-растворителя и различающиеся между собой количеством примесных молекул (тип кластера) при равном общем количестве молекул, определяемом эффективным координационным числом (ЭКЧ) молекулы в кристалле. Для определения концентраций различных типов кластеров, образующихся в образце при введении определенного количества примеси, мы провели расчет распределения примесей по объему кристалла в зависимости от ее концентрации. Расчет производился с помощью уравнения для повторных испытаний [11]

$$C_n = \frac{a!}{n!(a-n)!} \beta^n (1-\beta)^{a-n}, \quad (1)$$

где C_n — концентрация кластеров типа n ; a — размер кластера; β — относительная концентрация молекул примеси; n — число мест в кластере, занятых молекулами примеси (тип кластера). Из расчета, проведенного при значении ЭКЧ, равном 10, получено, что центры, соответствующие изменению концентрации примеси примерно на 9% (см. рис. 2), отличаются друг от друга изменением количества примесных молекул в кластере на одну. Хорошее согласие расчетных и экспериментальных результатов позволило вывести уравнение для определения частот чисто электронных переходов в дефектных L (молекулы кристалла-растворителя) и примесных D центрах, входящих в состав кластера K :

$$\nu_0^n = \nu_0^n \mp n \Delta\nu, \quad (2)$$

где ν_0^n — частота чисто электронного перехода молекул идеального кристалла; $\Delta\nu$ — величина, характеризующая смещение частоты электронного перехода при замене ближайшей молекулы кристалла-растворителя на примесную (определяется из рис. 3): знак «—» для центров $RbUO_2(NO_3)_3$, а знак «+» для примесных центров $CsUO_2(NO_3)_3$.

Полученные результаты в целом согласуются с представлениями, развитыми в работах [12, 13] о том, что энергия взаимодействия примесных молекул между собой и с молекулами кристалла-растворителя будет различна, а поэтому изменение числа примесных молекул в выделенном кластере приведет к изменению частот переходов как функции числа примесных молекул. В рассматриваемом нами случае эта функция выражается простой линейной зависимостью и хорошо согласуется с результатами [14], полученными для изотопических растворов замещения.

Для выяснения особенностей переноса энергии между различными центрами проведены исследования спектров люминесценции СТР (Rb, Cs^*) $UO_2(NO_3)_3$ при 4,2 К. Анализ спектров, приведенных на рис. 2, показал, что при понижении температуры от 77 до 4,2 К полосы становятся более узкими ($10-14 \text{ см}^{-1}$) и наиболее интенсивно проявляются полосы, которые принадлежат наиболее длинноволновому локальному (дефектному) центру, соответствующему данной концентрации примеси (табл. 2). При концентрации примеси, равной 10%, кроме полос, принадлежащих локальному центру L_2 ($\nu_0(L_2) = 21168 \text{ см}^{-1}$), в спектре интенсивно проявляются полосы, принадлежащие примесному центру D_2 ($\nu_0(D_2) = 21144 \text{ см}^{-1}$). Следует отметить, что оба центра являются составляющими одного и того же типа кластера K_2 (см. рис. 3). На основании полученных результатов можно сделать заключение, что передача энергии электронного возбуждения к молекулам происходит в две стадии: свободные экситоны локализируются на дефектных центрах, выполняющих роль мелкой ловушки, а затем локализованные экситоны участвуют в переносе энергии к примесным молекулам, расположенным рядом. Для определения предельной глубины ловушки, интенсивно захватывающей мигрирующую энергию электронного возбуждения, мы проанализировали спектры люминесценции кристалла и порошка $RbUO_2(NO_3)_3$ с естественной концентрацией примеси $CsUO_2(NO_3)_3$ при 4,2 К. Анализ

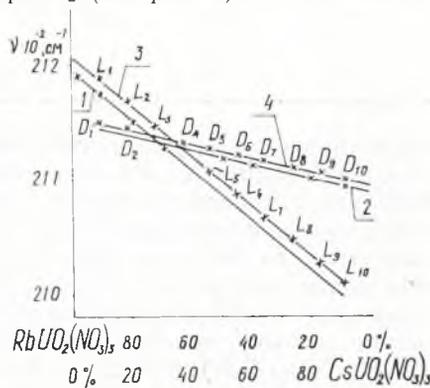


Рис. 3. Зависимость положения максимумов коротковолновых полос в спектрах люминесценции твердых растворов от концентрации примеси

Положение ν , относительные интенсивности $J_{\text{отн}}$ полос в спектрах люминесценции твердых растворов (Rb, Cs*) $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_3$ при $T = 4,2 \text{ K}$

		Концентрация примеси Cs $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_3$								Отнесение
естеств.		10		30		40		60		
$\nu, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{отн}}$	$\nu, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{отн}}$	$\nu, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{отн}}$	$\nu, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{отн}}$	$\nu, \text{см}^{-1}$	$J_{\text{отн}}$	
21205	156									$\nu_0 (I)$
21186	35									$\nu_0 (L_1)$
21167	46	21168	169							$\nu_0 (L_2)$
21149	21									$\nu_0 (L_3)$
21145	31	21144	282							$\nu_0 (D_2)$
21126	31			21126	397					$\nu_0 (L_4)$
21116	33							21116	350	$\nu_0 (D_6)$
21106	30					21106	360			
20951	97	20954	92							
20937	97	20936	165							
20910	33			20913	183					
								20904	240	
								20894	225	
				20663	60					
								20854	67	
								20838	63	
20314	740									$\nu_1 (I)$
20278	122	20279	389							$\nu_1 (L_2)$
		20251	600							$\nu_1 (D_2)$
20254	44									
20244	1000									$\nu_3 (II)$
				20235	630					$\nu_1 (L_1)$
								20278	696	$\nu_1 (D_6)$
								20220	640	$\nu_1 (L_5)$
20203	174	20203	600							$\nu_3 (L_2)$
20177	65	20176	1000							$\nu_3 (D_2)$
				20160	1000					$\nu_3 (L_4)$
								20154	1000	$\nu_3 (D_6)$
								20143	1000	$\nu_3 (L_5)$

интенсивностей показал, что линии, принадлежащие двум первым локальным центрам L_1 и L_2 (см. рис. 3, табл. 2) в спектре кристалла, значительно интенсивнее, чем в спектре порошка, а интенсивность линий остальных центров практически не изменяется. Из сказанного можно заключить, что за предельную глубину мелкой ловушки можно принять положение центра L_2 , отстоящего от основного на 38 см^{-1} . Используя полученное значение глубины ловушки для центра L_2 , в первом приближении можно оценить дебаевскую температуру Θ для кристалла $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ ($k\Theta \approx 38 \text{ см}^{-1}$, отсюда $\Theta \approx 60 \text{ K}$).

Основываясь на проведенных спектрально-люминесцентных исследованиях кристаллов $\text{RbUO}_2(\text{NO}_3)_3$ с примесями, можно утверждать, что часть линий в антистоксовой области спектра люминесценции, наблюдаемых в спектрах при 77 K , относится к свечению центров, состоящих из молекул кристалла-растворителя, находящихся вблизи меньших по раз-

меру молекул примеси. Кроме того, в спектрах люминесценции нами обнаружены переходы со второго возбужденного состояния, расположенного примерно на 200 см^{-1} выше первого. Излучение наблюдается как при температуре жидкого азота, так и при $4,2 \text{ К}$. Интенсивность линий при понижении температуры образца от 77 до $4,2 \text{ К}$ уменьшается примерно в три раза.

Таким образом, «мультиплетная» структура спектра вблизи $0 \rightarrow 0$ перехода и его комбинаций с полносимметричным валентным колебанием иона UO_2^{2+} обусловлена присутствием в кристаллах соединений уранила структурных и химических дефектов. Последний вид дефектов обусловлен присутствием в коммерческих препаратах солей уранила различных примесей, а структурные дефекты образуются в процессе роста и хранения кристалла. Суммарный спектр поглощения или люминесценции представляет собой суперпозицию спектров, принадлежащих отдельным центрам свечения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бурков В. И., Кизель В. А., Красилов Ю. И.— Оптика и спектроскопия, 1976, т. 40, с. 823.
2. Бурков В. И., Красилов Ю. И., Трофимова С. И.— ЖПС, 1978, т. 29, вып. 1, с. 80.
3. Володько Л. В., Комяк А. И., Севченко А. Н., Умрейко Д. С.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1973, т. 37, с. 865.
4. Hall L. A., Dieke J. H.— J. Opt. Soc. Amer., 1957, v. 47, p. 1092.
5. Wong D. P., Wong A. G., Wong E. G.— J. Chem. Phys., 1972, v. 56, p. 2838.
6. Абрамов А. П., Разумова И. К., Толстой Н. А.— В кн.: Спектроскопия кристаллов. М., 1975, с. 330.
7. Мейер К. Физико-химическая кристаллография.— М., 1972.
8. Справочник показателей качества химических реактивов.— М., 1968, т. 2, с. 770.
9. Ахметов Н. С. Неорганическая химия.— М., 1975.
10. Володько Л. В., Зажогин А. П., Комяк А. И.— Докл. АН БССР, 1979, т. 23, № 9, с. 791.
11. Анго А. Математика для электро- и радиоинженеров.— М., 1965, с. 596.
12. Агранович В. И. Теория экситонов.— М., 1968.
13. Лубченко А. Ф. Квантовые переходы в примесных центрах твердых тел.— Киев, 1978, с. 268.
14. Броуде В. Л., Рашба Э. И.— ФТТ, 1961, т. 3, вып. 7, с. 1941.

Кафедра спектроскопии и квантовой электроники

УДК 547.96.535.37

Е. В. БАРКОВСКИЙ, Н. А. ПРОКОШИНА, Н. Н. ХОВРАТОВИЧ, С. Н. ЧЕРЕНКЕВИЧ

СПЕКТРАЛЬНО-ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТРОМБИНА

Тромбин является ведущим ферментом системы свертывания крови. В настоящее время определены аминокислотный состав и последовательность аминокислот в молекуле, изучаются различные формы структурного состояния молекулы, строение активного центра [1—6]. Получены абсорбционные характеристики при двух значениях рН [7].

В настоящей работе приведены данные спектрально-люминесцентных исследований тромбина. Использовали коммерческий препарат тромбина крупного рогатого скота, выпускаемый Каунасским предприятием бакпрепаратов. Очистку производили методом колоночной гель-хроматографии на сефадексах $G-100$ и $G-75$. Была получена димерная фракция тромбина с молекулярным весом 80000 .

Электронные спектры поглощения регистрировались на спектрофотометре Spexord UV VIS (ГДР), дифференциальные спектры флуоресценции — на установке Fica (Франция), возбуждение осуществляли излучением с $\lambda 270, 280$ и 296 нм .

Спектры поглощения. На рис. 1 (кривая 1) изображен спектр поглощения тромбина в трис-НСI буфере при рН 7,5 (без поправки на свето-

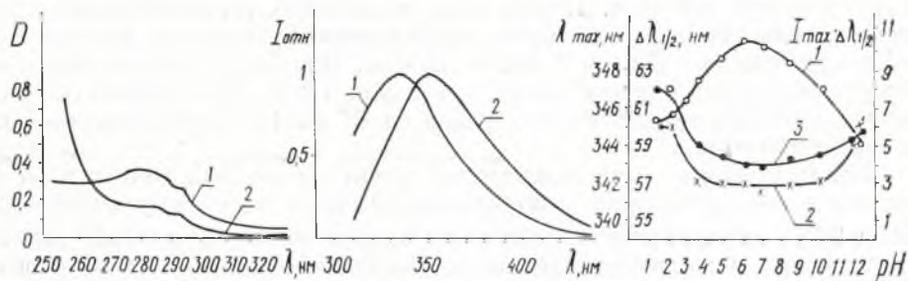


Рис. 1. Спектры поглощения тромбина:

1 — тромбин в трис-HCl буфере (pH 7,5); 2 — тромбин, денатурированный 8 М мочевиной

Рис. 2. Спектры флуоресценции тромбина при $\lambda_{возб} = 280$ нм:

1 — тромбин в трис-HCl буфере, pH 7,5; 2 — тромбин в трис-HCl буфере (pH 7,5), денатурированный 8 М мочевиной

Рис. 3. Зависимость параметров полосы флуоресценции тромбина в трис-HCl буфере от pH ($\lambda_{возб} = 280$ нм):

1 — $J_{max} \cdot \Delta\lambda_{1/2}$; 2 — λ_{max} ; 3 — $\Delta\lambda_{1/2}$

рассеяние). Наличие максимумов при 280 и 290 нм свидетельствует о преимущественном вкладе в спектр поглощения тромбина триптофановых остатков [8]. Аналогичен характер спектра и для препаратов тромбина, диализованных против воды и уксусно-аммонийного буфера. Незначительное коротковолновое смещение максимумов в их спектрах, вероятно, обусловлено большей доступностью молекул воды к триптофановым остаткам при переходе от трис-HCl буфера к воде как растворителю. В спектре тромбина, денатурированного 8 М мочевиной с добавлением сульфата натрия (кривая 2, рис. 1), наблюдается возрастание оптической плотности в области ниже 270 нм и уменьшение рассеяния света ($D \sim 0$) в области выше 300 нм. Уменьшение рассеяния, по-видимому, можно связать с разрушением ассоциатов молекул тромбина при денатурации.

Изучено влияние pH среды на спектры поглощения (pH варьировали от 1,3 до 12,3). Спектры поглощения тромбина для кислот и щелочной сред заметно отличаются от спектра при pH 7,5. Для спектров кислотной среды характерен сдвиг в коротковолновую область, подобный наблюдаемому для протонированного тромбина [9]. Для спектров щелочной среды — длинноволновый сдвиг. Последний, по-видимому, обусловлен значительным вкладом в поглощение в области 290 нм ионизированной формы тирозилов тромбина.

Таким образом, спектр поглощения тромбина в нейтральной и кислой средах в основном определяется триптофанилами белка. В сильнощелочной среде заметный вклад в поглощение вносят тирозилы. Спектр поглощения тромбина отражает чувствительность триптофанилов к изменению среды.

Спектры флуоресценции. Спектр флуоресценции (рис. 2, кривая 1) тромбина в трис-HCl буфере (pH 7,5) имеет обычную для белков форму. Зависимость положения максимума полосы флуоресценции от $\lambda_{возб}$ незначительна. Она обнаруживается лишь при анализе величины $\beta = I_{320}/I_{370}$ [10] и может быть обусловлена как гетерогенностью триптофанилов в тромбине, так и вкладом люминесценции тирозиновых остатков. Обработка данных по методу [10] показала, что при pH 7,5 люминесценция тромбина обусловлена только триптофанилами, что следует и из спектров поглощения.

Положение максимума ($\lambda_{max} = 333$ нм) и большая полуширина ($\Delta\lambda_{1/2} = 62$ нм) полосы флуоресценции не согласуются с моделью трех состояний триптофанилов в белках, предложенной в работе [11]. Вероятно, для тромбина следует допустить существование большего числа состояний триптофанилов в белке, т. е. большей гетерогенности остатков

Действие 8 М мочевины и сульфита натрия на диализованный тромбин

Препарат	λ_{max} , нм	$\Delta\lambda_{1/2}$, нм	Условия опыта
1. Тромбин в воде, pH 7,5	337	51	непосредственно после диализа
2. Тромбин + 8 М мочевина	345	60	через 10 мин после добавления мочевины
3. Тромбин + 8 М мочевина	354	79	через неделю хранения в холодильнике ($t = 4^\circ\text{C}$)
4. Тромбин + 8 М мочевина + сульфит натрия	359	83	через 0,5 ч после добавления сульфита в препарат 3
5. Тромбин	342	61	препарат 1 хранился неделю в холодильнике ($t = 4^\circ\text{C}$)
6. Тромбин + 8 М мочевина	350	67	через 0,5 ч после добавления мочевины в препарат 5
7. Тромбин + 8 М мочевина	350	67	через 1,5 ч после добавления мочевины в препарат 5
8. Тромбин + сульфит натрия	345	63	через 1 ч после добавления сульфита натрия в препарат 5

триптофана. Не исключено, что наблюдаемые особенности спектров флуоресценции могут быть следствием нестабильности молекулы тромбина (наличие в растворе продуктов автолиза).

Изучено действие денатурантов (мочевина, сульфит натрия) на диализованный против воды тромбин (см. таблицу). Установлено, что мочевина вызывает заметное смещение полосы флуоресценции в длинноволновую область и ее уширение. То же наблюдается и при ее воздействии на тромбин в трис-НСI буфере (см. рис. 2, кривая 2). Замечено, что выдерживание тромбина с мочевиной в течение 0,5—1,5 ч дает установившиеся параметры полосы, характерные для спектров денатурированных белков, а время 10 мин является недостаточным.

Полоса флуоресценции растворов тромбина, длительно хранившихся при 4°C , испытывает дальнейшее смещение и уширение, изменяется ее форма. Дополнительное действие сульфита натрия усиливает отмеченные закономерности.

Изучено влияние pH среды на спектр флуоресценции тромбина в трис-НСI буфере. Зависимость параметров спектра от pH представлена на рис. 3. Получено, что наименьшее значение λ_{max} и $\Delta\lambda_{1/2}$, наибольшее $I_{\text{max}}\Delta\lambda_{1/2}$ характерны для области pH 5—9 (область физиологического значения pH). С переходом как в щелочную, так и в кислую области наблюдается смещение максимума полосы в длинноволновую сторону, ее уширение и уменьшение $I_{\text{max}}\Delta\lambda_{1/2}$. Изменение этих параметров может происходить из-за конформационных перестроек, а также в результате тушения или изменения подвижности воды и поверхностных полярных групп при изменении ионного состояния соседних групп.

Для выяснения причин изменения спектральных параметров проведен анализ разностных спектров при различных pH . Если разностный спектр флуоресценции обусловлен простым тушением или возгоранием, он должен иметь форму, соответствующую спектру остатков, претерпевших изменение выхода. Если же один или более остатков триптофана переходит из одного микроокружения в другое в результате конформационных изменений, разностный спектр должен иметь точку пересечения с осью абсцисс и, соответственно, положительную и отрицательную компоненты [12]. На основании анализа можно констатировать конформационный переход тромбина в областях pH 10—12 и 3,7—2,5. В области остальных pH имеет место тушение. К сожалению, в литературе отсутствуют данные по пространственному расположению аминокислотных остатков в молекуле тромбина, а данные по первичной структуре [1] по-

казывают, что большинство остатков триптофана в молекуле тромбина (пять из девяти) имеют ближайшими соседями катионные остатки аминокислот (лизин, аргинин).

Для определения промежуточных состояний с небольшими изменениями спектральных параметров использованы зависимости интенсивностей флуоресценции при различных длинах волн для разных pH [13]. Это позволило в области pH 5—9 определить значение pH 6,1, соответствующее состоянию тромбина, с которого начинаются плавные изменения состояния молекул при изменении pH как в щелочную, так и в кислую область (возможно, это самое устойчивое состояние тромбина).

Таким образом, спектры флуоресценции тромбина являются весьма чувствительными к изменениям конформации молекул.

ЛИТЕРАТУРА

1. Magnusson S.—Folia haematol (DDR), 1972, В. 98, N 4, S. 285.
2. Seegers W. H., Beuterby J., Murano G., Meloy H., Agrawal B.—Trambos Daihes haemrrn, 1971, Suppl 47, p. 325.
3. Lunblad R. L., Uhteg L. C., Vogel C. W., Kindon H. S., Mann K. G.—Biochem and Biophys. Res Communs, 1975, v. 66, N 2, p. 482.
4. Федоряк Д. М., Кибирев В. К., Серейская А. А., Серебряный С. Б.—В сб.: Молекулярная биология. Киев, 1977, вып. 17, с. 64.
5. Струкова С. М.—Вестн. МГУ. Сер. биол. и почвоведение, 1976, № 1, с. 17.
6. Струкова С. М., Умарова Б. А., Киреева Е. Г., Кудряшов Б. А.—Биохимия, 1978, т. 43, вып. 4, с. 708.
7. Kotoku J., Matsushima A., Bando J., Inada J.—Biochim, Biophys Acta, 1970, v. 214, N 3, p. 490.
8. Черницкий Е. А. Люминесценция и структурная лабильность белков в растворе и клетке.—Минск, 1972, с. 111.
9. Черницкий Е. А., там же, с. 75.
10. Туроверов К. К., Щелчков Б. В.—Биофизика, 1970, т. 15, вып. 6, с. 965.
11. Веденкина Н. С., Бурштейн Э. А.—Молекулярная биология, 1970, т. 4, вып. 5, с. 743.
12. Веденкина Н. А., Буколова Т. Г., Ивкова М. Н., Бурштейн Э. А.—Молекулярная биология, 1971, т. 5, вып. 6, с. 809.
13. Бурштейн Э. А.—В сб.: Биофизика. Итоги науки и техники, ВИНТИ АН СССР. М., 1977, т. 7, с. 132.

Кафедра биофизики

УДК 532.783 : 535.33

И. П. ЗЯТЬКОВ, Г. А. ПИЦЕВИЧ, Д. И. САГАЙДАК

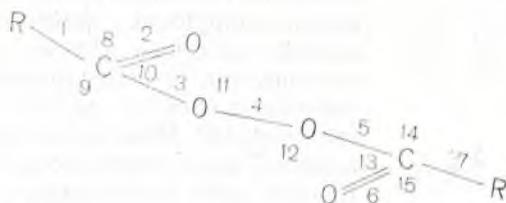
О КОРРЕЛЯЦИИ СПЕКТРАЛЬНЫХ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЕРОКСИДОВ АЦИЛОВ

Для ряда пероксидов ацилов наблюдалась связь между константами скорости термораспада k_d , а также константами скорости иницирования реакции полимеризации $k_{ин}$, с одной стороны, и константами Гаммета и Тафта — с другой [1, 2]. Поиск и установление корреляций между спектральными и химико-технологическими характеристиками пероксидов позволили бы разработать экспрессные методы определения их технологически важных параметров в реакциях иницирования полимеризации и прогнозировать последние для новых представителей гомологических рядов.

Нами исследованы колебательные спектры (КР и ИК) ряда симметричных и несимметричных ароматических и арилифатических пероксидов, отдельные представители которых являются как широко известными, так и специфическими инициаторами полимеризации [3].

Для пероксидов рядов I—IV $RC_6H_4C(O)OOC(O)C_6H_4R$ (I), $RC_6H_4C(O)OOC(O)C_6H_5$ (II), $RC_6H_4C(O)OOC(O)CH_3$ (III), $[CH_3(CH_2)_nC(O)O]_2$ (IV) термоустойчивость $k_d = A \exp(-E_{дис}/k \cdot T)$, а следова-

Процентный вклад в потенциальную энергию колебаний молекул пероксида бензоила (1) и ацетилбензоила (2) некоторых координат пероксидной цепочки



Пероксид	Частоты см ⁻¹	C=O (2)	C=O (6)	O—O (4)	C—O (3)	C—O (5)	RCO (8, 15)	COO (11, 12)	OCO (10, 13)	RCO (9, 14)
1	1790	35	33	—	6	5	4	—	—	10
	1768	33	35	—	5	6	5	—	—	11
	965	5	4	30	10	9	—	6	—	7
	838	2	2	19	5	4	19	—	19	—
2	1821	78	—	—	8	—	—	—	—	8
	1760	—	65	—	—	7	11	—	—	—
	926	—	—	21	10	9	—	—	—	—
	864	—	8	10	10	13	—	—	11	—

тельно, и инициирующая активность $k_{ин} = 2fk_d$ определяется главным образом энергией диссоциации функциональной O—O-связи, поскольку предэкспоненциальный множитель A квазипостоянен в пределах гомологического ряда. Расчет нормальных колебаний для некоторых представителей рядов I, II, III показал [4, 5], что вклад $\nu_{O—O}$ в изменение потенциальной энергии колебания молекулы пероксида на частотах в области 800—1050 см⁻¹ составляет от 3 до 30%. Несмотря на непосредственный вклад поглощения $\nu_{O—O}$ в рассматриваемой области, низкая характеристичность этих полос для $\nu_{O—O}$ не позволила найти строгой корреляции между спектральными и технологическими характеристиками. Как видно из данных расчета (см. таблицу), для высокохарактеристических полос поглощения в области 1750—1820 см⁻¹, кроме основного вклада $\nu_{C=O}$ (до 70—80%), в изменение потенциальной энергии, обеспечивающей это поглощение, включается до 20% суммарных валентных и валентно-деформационных колебаний связей и углов диацильной пероксидной группировки. Таким образом, оказывается, что в колебательном спектре информативными являются полосы, обусловленные поглощением (или рассеиванием) всей диацильной пероксидной группировки, как целого.

Нами уточнены ранее наблюдаемые корреляции для частот ИК спектров соединений рядов I, III и констант Гаммета [6] и выявлено существование аналогичных зависимостей для эквивалентных полос в спектрах КР. Линейный характер зависимостей ($\nu_{C=O} - \sigma$), наблюдаемый для положительных значений σ -констант, заметно изменяется при переходе к отрицательным значениям констант, приобретая нелинейный, параболический вид (рис. 1, кривые I—III). Обращает на себя внимание и синергетический эффект индуцированного влияния двух заместителей для симметричных ароматических пероксидов, благодаря которому тангенс угла наклона кривых I (см. рис. 1) практически в два раза больше, чем для кривых II. В соответствии с расчетами [7] для пероксидов ряда I карбонильный дуплет образуется за счет синфазных и антифазных колебаний обеих C=O группировок, взаимодействие которых с заместителями идентично, что и подтверждается тождественным ходом зависи-

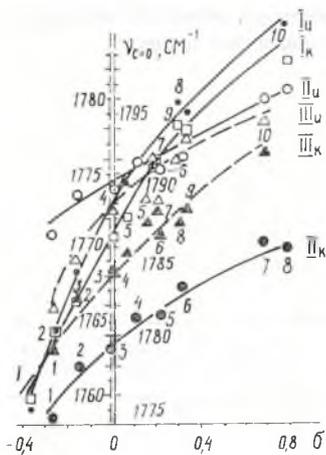


Рис. 1. Зависимости между максимумами полос $\nu_{C=O}$ в спектрах ИК поглощения (кривые I_u—III_u) и линий $\nu_{C=O}$ в спектрах КР (кривые I_k—III_k) для пероксидов рядов I—III и соответствующими σ — константами Гаммета:

I — R-п-ОН(1); п-ОСН₃(2); п-СН₃(3); Н(4); п-СI(6); п-Вr(7); п-F(5); м-F(8); м-СI(9); п-NO₂(10). II — R-п-ОСН₃(1); п-СН₃(2); Н(3); м-ОСН₃(4); п-СI(5); м-F(6); м-NO₂(7); п-NO₂(8). III — R-п-ОСН₃(1); п-СН₃(2); Н(3); п-F(4); п-1(5); п-СI(6); п-Вr(7); м-F(8); м-СI(9); м-NO₂(10). Нумерация кривых и точек соответствует нумерации рядов пероксидов и заместителей в них

споненциальный характер и описываются функцией $\nu_{C=O} = B \exp(-ak_d) + \nu_0$, где ν_0 — частота при бесконечно возрастающих электронодонорных свойствах заместителя. Для симметричных производных ряда I изменение положения максимумов обеих полос поглощения $\nu_{C=O}$ (высоко- и низкочастотной) имеет аналогичный вид, хотя для низкочастотного максимума разброс конкретных экспериментальных результатов вокруг аппроксимирующей кривой в 1,5—2 раза выше, чем для высокочастотного. Это, по-видимому, обусловлено большей чувствительностью антисимметричного колебания к конформационным факторам и, следовательно, сложным характером образования контура поглощения. Для пероксидов арилатического ряда III функциональная связь ($k_d \sim \nu_{C=O}$) наблюдается только для низкочастотной полосы как ИК, так и КР спектров. В целом характер зависимости $\nu_{C=O}$ от k_d по данным спектров ИК и КР для всех соединений трех исследуемых рядов аналогичен, т. е. увеличению k_d соответствует уменьшение $\nu_{C=O}$. Это говорит о том, что значения энергий диссоциации связей O—O и C=O уменьшаются при введении электронодонорных и увеличиваются при введении электроноакцепторных заместителей. Сопоставляя экспериментальные данные работ [11] и [12] по термическому распаду симметричных пероксидов арилатического ряда IV с их ИК спектрами, мы получили связь k_d — $\nu_{C=O}$ (см. рис. 2, кривая IV), совпадающую по характеру с зависимостями для рядов I, II и III.

Из факта существования линейной связи между константами диссоциации и иницирования следует, что константа иницирования паритетно зависит от термоустойчивости пероксидной связи, а также от подвижности и активности образующихся радикалов. Первой фундаментальной работой, содержащей данные по k_{III} симметричных замещенных пероксидов бензола, явилось сообщение [13], в котором k_{III} найдены при

мостей ($\nu_{C=O}-\sigma$) как для высоко-, так и для низкочастотных максимумов. Разброс значений частот максимумов полос $\nu_{C=O}$ вокруг аппроксимирующих кривых для спектров КР меньше разброса для $\nu_{C=O}$ в спектрах ИК поглощения, что обусловлено более высокой точностью отсчета частоты ($\pm 0,5 \text{ см}^{-1}$) для спектров КР. Изменение частот поглощения карбонильных группировок соединений ряда III отчетливо демонстрирует уменьшение передачи индуктивного эффекта с ростом расстояния. В этом случае для высокочастотной полосы практически отсутствуют закономерные изменения частоты, тогда как низкочастотный максимум подчиняется графическим закономерностям (см. рис. 1, кривые III).

Систематические данные по константам скорости термораспада имеются лишь для симметричных замещенных пероксидов бензола [8—10]. Для несимметричных пероксидов бензола и пероксидов арилатического ряда k_d были определены при 80 °С в четыреххлористом углероде. Термораспад проводился в спектральных термокуветах, и k_d определялись с использованием как пиковых, так и интегральных интенсивностей полос ИК поглощения. Результаты обрабатывались по методу наименьших квадратов.

Корреляционные зависимости, связывающие k_d с положениями максимумов полос $\nu_{C=O}$ в ИК и КР спектрах (рис. 2), носят эк-

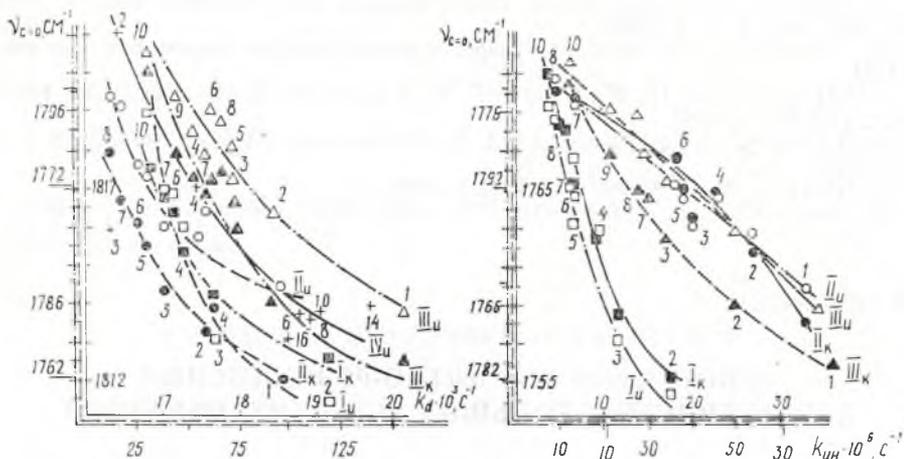


Рис. 2. Связь k_d пероксидов рядов I—IV с положениями максимумов полос $\nu_{C=O}$ в спектрах ИК поглощения (кривые I_u—IV_u) и линий $\nu_{C=O}$ в спектрах КР (кривые I_k—III_k) нумерация кривых и точек соответствует нумерации рядов пероксидов и заместителей в них

Рис. 3. Связь $k_{ин}$ пероксидов рядов I—III с положениями максимумов полос $\nu_{C=O}$ в спектрах ИК поглощения (кривые I_u—III_u) и линий $\nu_{C=O}$ в спектрах КР (кривые I_k—III_k) нумерация кривых и точек соответствует нумерации рядов пероксидов и заместителей в них

полимеризации стирола. Нами получены эти константы для несимметричных пероксидов бензоила ряда II и ранее [14] для аралифатических пероксидов.

Из сопоставления данных по константам скоростей термораспада и константам инициирования реакции полимеризации (рис. 2 и рис. 3) для исследованных пероксидов следует, что зависимость эффективности f образующихся радикалов от σ констант и частот $\nu_{C=O}$ носит нелинейный характер. Связь между эффективностью f радикалов и $\nu_{C=O}$ или σ константами открывает пути дальнейшего учета и прогнозирования влияния концентрационных и структурных факторов на поведение пероксидов в технологических процессах.

Таким образом, несмотря на нелинейный характер зависимости $\nu_{C=O}—\sigma$, $\nu_{C=O}—k_d$, основная технологическая характеристика пероксидов, константа инициирования процесса полимеризации, для наиболее широко используемых классов пероксидов имеет практически линейный ход в пределах одного гомологического ряда, что позволяет прогнозировать основные направления модификации пероксидов с целью создания инициаторов полимеризации и вулканизации с заданными технологическими свойствами, а также количественно оценивать константу инициирования вновь синтезируемых пероксидов только по их колебательным спектрам.

ЛИТЕРАТУРА

1. Антоновский В. Л. Органические перекисные инициаторы.— М., 1972.
2. Волошовский Н. С., Иванчев С. С.— ЖОХ, 1974, т. 44, вып. 4, с.892.
3. Рахимов А. И. Химия и технология органических перекисных соединений.— М., 1979.
4. Зятков И. П., Гоголинский В. И., Сивчик В. В., Сагайдак Д. И.— ЖПС, 1978, т. 29, вып. 4, с. 652.
5. Гоголинский В. И., Сагайдак Д. И., Зятков И. П. О влиянии типа заместителя на ИК поглощение функциональной группировки С(О)ОО(О)С: Тез. докл. 7-й Всесоюзной конф. по химии орган. пероксидов.— Волгоград, 1980, с. 191.
6. Davison W. H. T.— J. Chem. Soc., 1951, p. 2456.
7. Bellamy L. J., Connelly B. R., Philpotts A. R. and Williams R. L.— Zeitschrift. Electrochim., 1960, B. 64, N 5, S. 563.
8. Swain C. G., Stockmayer W. H., Clarke J. T.— J. Amer. Chem. Soc., 1950, v. 72, p. 5426.

9. Matsuji Takebayasin, Taduо Shingaki and Yasumaka Ino—J. Amer. Chem. Soc., 1953, v. 73, p. 3883.

10. Денисов Е. Т. Константы скорости гомолитических жидкостных реакций.— М., 1971.

11. Юрженко А. И., Иванчев С. С., Галибей В. И.— Докл. АН БССР, 1961, т. 140, № 6, с. 1348.

12. Иванчев С. С., Юрженко А. И., Анисимов Ю. И.— ЖФХ, 1965, т. 39, № 8, с. 792.

13. Cooper W.— J. Chem. Soc., 1951, p. 3106.

14. Ольдекоп Ю. А., Былина Г. С.— Высокомолекул. соед., 1964, т. 6, с. 1617.

Кафедра физической оптики

УДК 620.183(088.8)

Г. Я. СЛЕПЯН, Е. Я. ФУРСА, С. С. ШУШКЕВИЧ

ТОПОГРАФИЯ МАГНИТНО-РЕЗОНАНСНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК БОЛЬШИХ ПЛОСКИХ ОБРАЗЦОВ

Изучение или контроль некоторых объектов методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) наталкивается на трудности, связанные со специфическими требованиями к исследуемым образцам, размеры которых должны соответствовать размерам рабочего резонатора радиоспектрометра, а при сильном нерезонансном поглощении исследуемого вещества быть еще меньше, чтобы не попадать в лучность электрической компоненты микроволнового поля. В противном случае добротность рабочего резонатора, а следовательно, и чувствительность радиоспектрометра ЭПР резко снижаются. К такому же эффекту приводит наличие в резонаторе больших отверстий для ввода и вывода образца. В итоге потенциальные возможности ЭПР как метода неразрушающего контроля и средства изучения водосодержащих, например, биологических, объектов не всегда могут быть реализованы. Тем не менее, локальные участки плоских структур типа полупроводниковых пластин, подложек интегральных схем на различных стадиях технологической обработки, тонких пленок, листьев растений, включая и находящиеся в процессе роста, могут быть исследованы методом ЭПР без ощутимого воздействия всего образца на параметры радиоспектрометра. Это достигается благодаря применению рабочего резонатора специальной конструкции, который обеспечивает как фокусировку магнитной H -компоненты микроволнового поля в строго определенном месте полости, содержащей образец, так и экранирование от микроволнового поля остальной части образца.

Способ последовательной регистрации спектров ЭПР от отдельных участков образца назовем для краткости ЭПР-скенированием (ЭПР-С). Реализации метода ЭПР-С базируются на размещении образца с внешней стороны резонатора, возле сквозного отверстия в его стенке в районе лучности магнитной компоненты микроволнового поля [1]. Резонансные условия создаются только в небольшой части исследуемого образца, расположенной перед отверстием. Перемещая образец, получают топографию его магнитно-резонансных характеристик. Пространственное разрешение и чувствительность метода зависят от локализации и интенсивности H -компоненты, перпендикулярной к поляризующему магнитному полю H_0 . Для повышения пространственной разрешающей способности предложено дополнительно локализовать поле модуляции на исследуемой части образца [2].

Основной недостаток методов ЭПР-С — низкая чувствительность. Увеличение отверстия связи не дает желаемого эффекта из-за возрастающих потерь на излучение. Несколько улучшает дело сверхпроводящий резонатор [3], но это, естественно, является значительным усложнением эксперимента в целом и далеко не всегда может быть использовано для решения прикладных задач. Применительно к методу ЭПР-С вопрос о характере распределения интенсивности микроволнового поля возле отверстия в резонаторе в известной нам литературе не обсуждался. Как

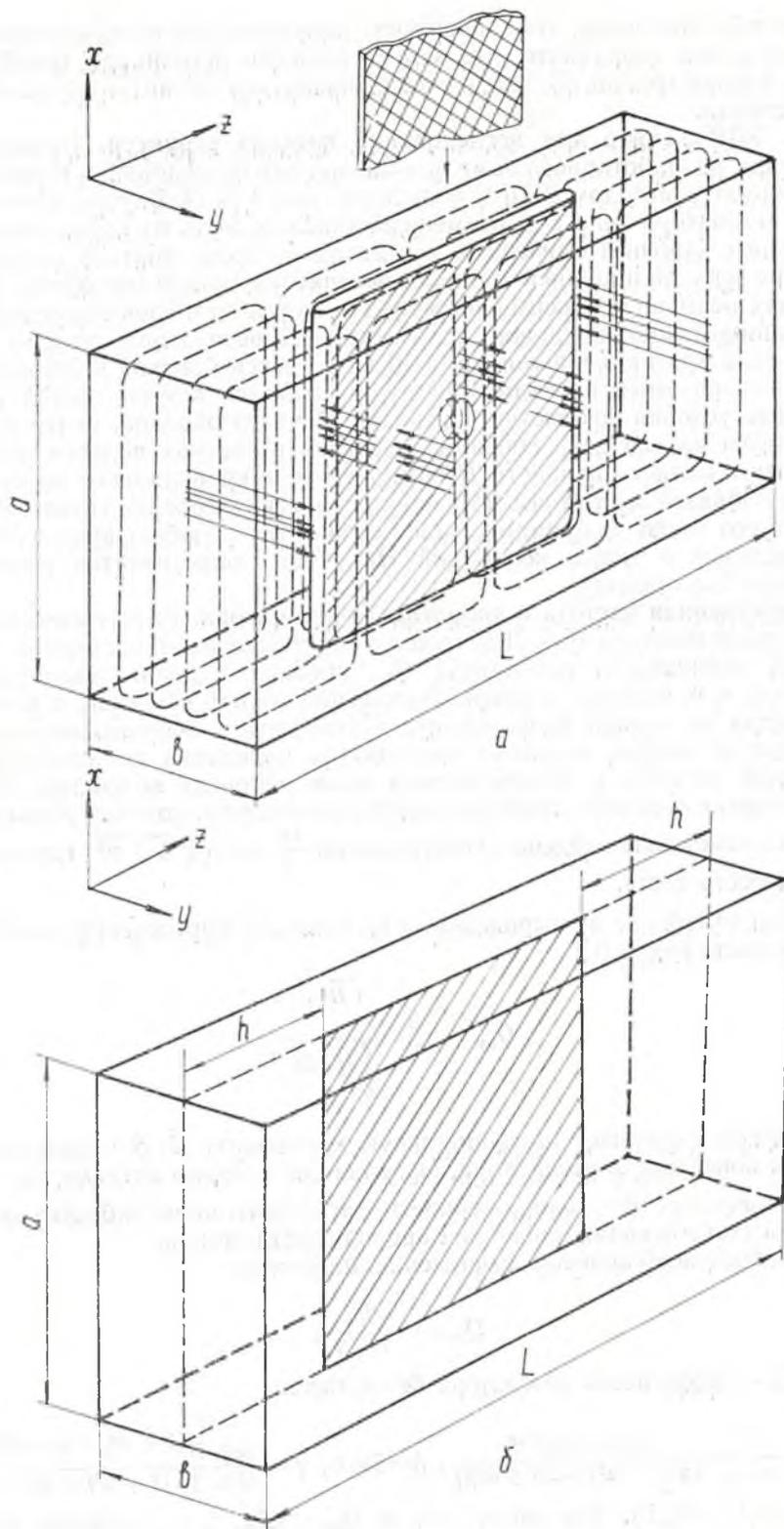


Рис. 1. Устройство резонатора и структура электромагнитного поля при типе колебаний H_{104} (а) и модель для расчета (б)

будет показано ниже, эта зависимость является явно не монотонной хотя бы по одной координате, что может служить источником ошибок при определении границ областей с отличающимися магнитно-резонансными свойствами.

1. **ЭПР-скеннер для исследования плоских структур.** Принцип построения разработанного нами резонатора для исследования тонких плоских структур методом ЭПР-С поясняется рис. 1 [4, 5]. Внутри прямоугольного резонатора типа H_{104} размещена узкая полость из проводящего материала с хорошим омическим контактом по всему контуру соприкосновения с верхней и нижней стенками резонатора (пайка серебром). Стенки полости размещены преимущественно по нормали к электрическому силовым линиям микроволнового поля исходного резонатора, поэтому структура поля при наличии тонкой полости остается близкой к первоначальной. Исследуемый плоский образец помещается внутри полости. Резонансные условия создаются в небольшой части образца, центр которой находится на оси двух соосных отверстий в стенках полости, расположенных в области пучности H -компоненты микроволнового поля. Перемещая образец внутри полости, можно зарегистрировать сигнал ЭПР от любой его части. В принципе можно работать с любым прямоугольным резонатором с типом колебаний H_{10n} , где n определяется размерами исследуемых образцов.

Собственная частота и добротность резонатора. Расчет выполним на примере резонатора H_{102} . Для вычисления резонансной частоты ω_0 и омической добротности резонатора $Q_{\text{пр}}$ принята модель, показанная на рис. 1, б, т. е. полость заменена бесконечно тонкой вставкой, а влиянием отверстия на первой фазе анализа пренебрегаем. Можно показать, что бесконечно тонкая идеально проводящая пластинка не изменяет собственной частоты и распределения поля рабочего колебания H_{102} по сравнению с обычным прямоугольным резонатором, поэтому резонансная частота может быть найдена из соотношения $\frac{\omega_0}{c} a = \pi \sqrt{1 + \alpha^2}$, где $\alpha = \frac{2a}{L}$; c — скорость света.

Если колебание не вырождено и не близко к вырождению, омическая добротность равна [1]:

$$Q_{\text{пр}} = \frac{2}{\Delta_0} \frac{\int_V \vec{H}^2 dV}{\int_S \vec{H}_\tau^2 dS},$$

где символ τ означает тангенциальную компоненту \vec{H} ; S — полная внутренняя поверхность резонатора, включая обе стороны вставки; Δ_0 — глубина скин-слоя; \vec{H} — напряженность магнитного поля рабочего колебания, соответствующая идеальной проводимости стенок.

Проводя необходимые вычисления, получаем

$$Q_{\text{пр}} = \frac{Q_{\text{пр}}^0}{1 + \gamma},$$

где $Q_{\text{пр}}^0$ — добротность резонатора без вставки:

$$Q_{\text{пр}}^0 = \frac{c}{\omega_0 \Delta_0} \frac{\pi \beta (1 + \alpha^2)^{3/2}}{[\alpha (1 + \alpha^2) + 2\beta + \alpha^3 \beta]}, \quad \beta = 2b/L, \quad \gamma = \frac{\alpha Y}{2\pi} \frac{[(1 + \alpha^2) - (1 - \alpha^2) \frac{\sin Y}{Y}]}{[\alpha (1 + \alpha^2) + 2\beta + \alpha^3 \beta]},$$

$Y = 2\pi(1 - 2h/L)$. Так как $\gamma > 0$, то $Q_{\text{пр}} < Q_{\text{пр}}^0$, т. е. введение вставки несколько снижает омическую добротность. При $h \rightarrow L/2$, $Y \rightarrow 0$ и $Q_{\text{пр}} \rightarrow Q_{\text{пр}}^0$.

Численный метод расчета магнитного поля на отверстии и внутри полости. Предположим, что отверстие с характерным размером $d \ll \lambda$ расположено в пучности магнитного поля. Рассчитаем структуру магнит-

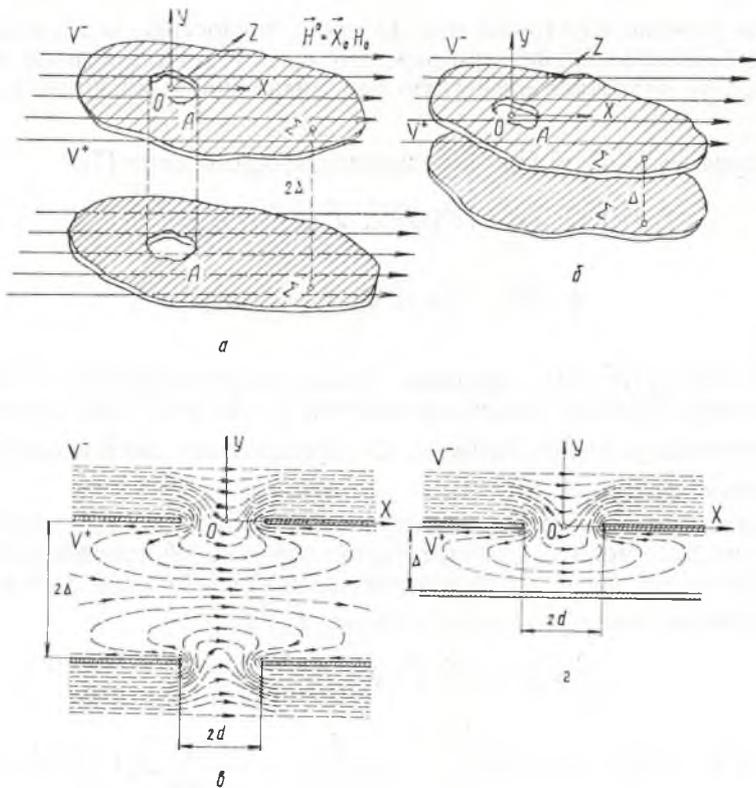


Рис. 2. Геометрия задачи (а, б) и качественная структура магнитного поля на плоской щели (в, г)

ного поля внутри полости и на отверстии. Так как отверстие мало, в его пределах можно пренебречь запаздыванием и считать, что поле резонатора со вставкой без отверстия строго однородно и имеет только x -составляющую: $\vec{H}^{v0} = x_0 H_0$, ($H_0 = \text{const}$). Таким образом, задачу о «просачивании» поля резонатора внутрь полости (см. рис. 1, а) можно заменить модельной задачей о просачивании однородного квазистатического поля $\vec{H}^0 = x_0 H_0$ внутрь области U^+ , ограниченной двумя параллельными бесконечно тонкими металлическими плоскостями с идентичными, расположенными друг под другом, отверстиями A (рис. 2, а, в). В силу свойств симметрии данной задачи одну из плоскостей с отверстием (например, $y = -2\Delta$) можно заменить сплошной металлической плоскостью $y = -\Delta$ (рис. 2, б, г). Эту задачу мы и будем решать. Контур отверстия предполагаем достаточно гладким.

Квазистатическое магнитное поле представим в виде [6]

$$\vec{H} = -\text{grad } \psi, \quad (1)$$

где потенциал $\psi(\vec{R})$ удовлетворяет уравнению Лапласа

$$\nabla^2 \psi = 0, \quad (2)$$

граничному условию Неймана на обеих сторонах поверхностей Σ , условию непрерывности и скачка нормальной производной на отверстии:

$$\psi^+(z) - \psi^-(z)|_A = 0, \quad \left. \frac{\partial \psi^+}{\partial \vec{n}_+} - \frac{\partial \psi^-}{\partial \vec{n}_-} \right|_A = C - H_0 x, \quad (3)$$

а также условиям на бесконечности

$$\lim_{|\vec{R}| \rightarrow \infty} \psi^+(\vec{R}) = C - H_0 x, \quad \lim_{|\vec{R}| \rightarrow \infty} \psi^-(\vec{R}) = 0.$$

Второе условие (3) также определено с точностью до произвольной константы, исключаяющейся при переходе от потенциала к полю по формуле (1). Это отражает известную неоднозначность магнитного потенциала.

Представим $\vec{\psi}^\pm(\vec{R})$ в виде потенциалов простого слоя [7]:

$$\vec{\psi}^-(\vec{R}) = - \int_A \sigma(\vec{z}') G(\vec{R}, \vec{z}') dA - H_0 x + C, \quad (4)$$

$$\vec{\psi}^+(\vec{R}) = \int_A \sigma(\vec{z}') g(\vec{R}, \vec{z}') dA, \quad (5)$$

где $G(\vec{R}, \vec{R}')$, $g(\vec{R}, \vec{R}')$ — функции Грина полупространства и области V^+ , заключенной между двумя плоскостями $y = 0$, $y = -\Delta$, удовлетворяющие граничным условиям Неймана, C — произвольная постоянная; $\sigma(\vec{z}')$ — неизвестная функция, $\vec{z}, \vec{z}' \in A$.

Представления (4) и (5) удовлетворяют уравнению (2), граничным условиям на Σ и имеют требуемый скачок нормальной производной на A . Сшивая (4) и (5) на A , получаем интегральное уравнение 1-го рода со слабой особенностью в ядре относительно $\sigma(\vec{z}')$:

$$\int_A \sigma(\vec{z}') K(\vec{z}, \vec{z}') dA = C - H_0 x, \quad (6)$$

где $K(\vec{z}, \vec{z}') = G(\vec{z}, \vec{z}') + g(\vec{z}, \vec{z}') = \frac{2}{|\vec{z} - \vec{z}'|} + \frac{4}{\Delta} \sum_{n=1}^{\infty} K_0\left(\frac{n\pi}{\Delta} |\vec{z} - \vec{z}'|\right) - \frac{2}{\Delta} \ln |\vec{z} - \vec{z}'|$; K_0 — функция Макдональда.

Ядро $K(\vec{z}, \vec{z}')$ определено с точностью до постоянного слагаемого, которое мы опускаем. Учет его равносителен переопределению константы C и не изменяет физически наблюдаемых величин. Для определения постоянной C на $\sigma(\vec{z}')$ налагается дополнительное условие

$$\int_A \sigma(\vec{z}') dA = 0, \quad (7)$$

соответствующее отсутствию потока магнитной индукции через отверстие [7].

Аналитическое решение интегрального уравнения (6) в общем случае затруднительно. Основываясь на методе саморегуляризации [8], разработаем численный алгоритм, пригодный для произвольной формы отверстия. Разобьем отверстие A на N элементов достаточно малых, чтобы неизвестную функцию $\sigma(\vec{z})$ в пределах одного элемента можно было приближенно считать постоянной. Тогда (6) можно заменить системой алгебраических уравнений вида

$$\sum_{j=1}^N \sigma(\vec{z}_j) \int_{A_j} K(\vec{z}_k, \vec{z}') dA = C - H_0 x_k. \quad (8)$$

$$k, j = \overline{1, N}.$$

Дополнительное условие (7) преобразуется к виду

$$\sum_{j=1}^N \sigma(\vec{z}_j) S_{A_j} = 0, \quad (9)$$

где S_{A_j} — площадь j -го элемента.

Соотношения (8) и (9) представляют систему $N + 1$ линейных алгебраических уравнений относительно $\sigma(\vec{z}_j)$, C ; число N выбирается исходя из требуемой точности расчета.

При вычислении матричных элементов $T_{jj} = \int_{A_j} K(\vec{z}_j, \vec{z}') dA$ необходимо, аналогично [9], выделить в явном виде особенность ядра; при этом система линейных уравнений (8), (9) является устойчивой [8, 9] и может быть эффективно решена на ЭВМ. После ее решения искомое магнитное поле в полости вычисляется по формуле $\vec{H}(\vec{R}) = -\text{grad} \sum_{j=1}^N \sigma(\vec{z}_j) \int_{A_j} g(\vec{R}, \vec{z}_j) dA$.

Анализ поля на отверстии в простейшей модели. Для получения качественной информации о структуре магнитного поля на отверстии и внутри полости обратимся к анализу простейшей модели — бесконечно длинной в направлении оси z щели (см. рис. 2, z). Для такой модели можно получить приближенные соотношения, не прибегая к численным методам. Рассмотрим наиболее простой случай, когда $\Delta \gg d$. Тогда $g(\vec{z}, \vec{z}') \approx G(\vec{z}, \vec{z}')$ и интегральное уравнение (6) можно записать в виде $\int_{-d}^d \sigma(x') \ln|x - x'| dx' = \frac{1}{8} (C - H_0 x)$. Дифференцируя это уравнение по x , получаем

$$\int_{-d}^d \sigma(x') \frac{dx'}{x - x'} = \frac{H_0}{8}.$$

Это сингулярное интегральное уравнение простейшего вида, решение которого может быть найдено в квадратурах путем сведения к задаче Римана [10]. Окончательный результат имеет вид [10]:

$$\sigma(x) = -\frac{H_0}{8\pi^2} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2}} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1 - \xi^2}}{\xi - \frac{x}{d}} d\xi + \frac{C_1}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2}}. \quad (10)$$

Из (7) получаем $C_1 = 0$ и, вычисляя интеграл в (10), имеем

$$\sigma(x) = -\frac{H_0}{8\pi} \frac{\frac{x}{d}}{\sqrt{1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2}}.$$

Интерес представляет x -составляющая магнитного поля, непосредственно взаимодействующая с образцом. С учетом (3) эту компоненту можно представить в виде

$$H_x(x, y) = -\frac{H_0}{2\Delta} \sum_{n=1}^{\infty} \cos \frac{n\pi}{\Delta} y \int_{-d}^d \frac{\frac{x'}{d}}{\sqrt{1 - \left(\frac{x'}{d}\right)^2}} \text{sign}(x - x') e^{-\frac{n\pi}{\Delta} |x - x'|} dx' \quad (11)$$

Проанализируем это выражение подробнее. При $|x| \gg d$ из (11) имеем

$$H_x(x, y) \simeq -B \cos \frac{\pi}{\Delta} y e^{-\frac{\pi}{\Delta} |x|}, \quad (12)$$

где B — некоторая положительная постоянная. Таким образом, с удалением от отверстия вдоль оси x H_x убывает экспоненциально, причем в области $|y| < \frac{\Delta}{2}$ оно направлено против первичного поля, а в области $\Delta < |y| < \frac{\Delta}{2}$ — по первичному полю.

Рассмотрим теперь поле под довольно узким отверстием $\left(\frac{\pi}{\Delta} |x-x'| \ll 1\right)$, но на достаточно большой глубине ($y \gg d$). Ряд в (11) можно просуммировать в явном виде, воспользовавшись соотношением [11]:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \cos \frac{n\pi}{\Delta} y e^{-\frac{n\pi}{\Delta} |x-x'|} = \frac{1}{2} \left[\frac{\operatorname{sh} \frac{\pi}{\Delta} |x-x'|}{\operatorname{ch} \frac{\pi}{\Delta} |x-x'| - \cos \frac{\pi y}{\Delta}} - 1 \right].$$

Вычисляя приближенно интеграл в (11) с учетом условий $\frac{\pi}{\Delta} |x-x'| \ll 1$, $y \gg d$, получаем

$$H_x(x, y) \approx \frac{H_0 d}{\Delta} \left[\sqrt{1 - \left(\frac{x}{d}\right)^2} + \frac{\pi^2 d}{4 \Delta (1 - \cos \frac{\pi y}{\Delta})} \right]. \quad (13)$$

Анализ этого выражения показывает, что с удалением от плоскости отверстия H_x уменьшается на величину $\sim \frac{d}{\Delta}$. Распределение по x имеет максимум при $x=0$; у краев отверстия $H_x(x, y)$ меньше (имеет порядок $\frac{d^2}{\Delta^2}$).

Рассмотрим поле в плоскости щели: $y=0$, $|x-x'| \ll \Delta$. Из (11) при этих условиях получаем следующее соотношение

$$H_x(x, y) \approx -\frac{H_0}{2\pi} \hat{g}\left(\frac{x}{d}\right). \quad (14)$$

Зависимость магнитного поля от координаты определяется безразмерным коэффициентом

$$\hat{g}\left(\frac{x}{d}\right) = \text{v. p.} \int_{-1}^1 \frac{\tau}{\sqrt{1-\tau^2}} \frac{d\tau}{\left(\frac{t}{d} - \tau\right)}.$$

В центре щели ($x=0$) из (13) получаем:

$$H_y \approx \frac{1}{2} H_0. \quad (15)$$

На краях отверстия ($x \rightarrow \pm d$) коэффициент \hat{g} стремится к $\mp \infty$, что соответствует известному краевому эффекту — особенности «на ребре» [12].

Соотношения (12)–(15) позволяют построить картину поля в полости (рис. 2, з). Эта картина качественно применима и к более сложной форме отверстий, например, круговой, что подтверждается экспериментально.

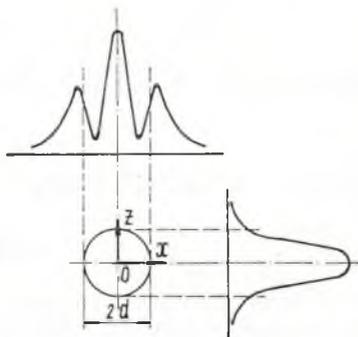


Рис. 3. Зависимость интенсивности сигнала ЭПР от координат x и z

2. Эксперимент. Методом точечного спинового репера [13] измерена величина микроволнового поля внутри полый проводящей вставки, помещенной в резонатор H_{102} . В центре вставки (область пучности H -компоненты) в обеих стенках просверливались соосные отверстия одинакового диаметра. Спиновый репер, в качестве которого использовался образец ДФПГ размером не более 0,1 мм, закреплялся на конце тонкого кварцевого стержня, перемещаемого внутри полости при помощи двух микрометрических винтов. Измерения проводились на спектрометре ЭПР, разработанном и изготовленном в БГУ имени В. И. Ленина [14], при частоте модуляции 1 кГц.

Результаты эксперимента приведены на рис. 3. Характер зависимости $|H_x(x, y)|^2$ согласуется с результатами теоретического анализа (рис. 2, в, г). По оси $x(z=0)$, помимо главного максимума $|H_x(x, y)|^2$, в центре отверстия имеются дополнительные максимумы на краях, соответствующие особенностям на ребре. В соответствии с расчетом поле в этих максимумах направлено противоположно полю в главном максимуме (и «первичному» полю в исходном резонаторе типа H_{102}). По оси $z(x=0)$ распределение $|H_x(x, y)|^2$ иное: дополнительные максимумы здесь отсутствуют. Это объясняется тем, что вдоль рассматриваемой оси компонента H_x проходит по касательной к отверстию, и решение особенностей не имеет [12].

Чувствительность спектрометра ЭПР с описанным резонатором сравнивалась с чувствительностью этого же спектрометра с резонатором H_{102} без вставки. Максимальное отношение сигнал/шум при эквивалентных условиях регистрации описанного спинового репера уменьшалось в случае резонатора с проводящей полостью не более чем в пять — семь раз. Диаметр отверстий связи составлял при этом 3 мм. Введение во внутрь полости водосодержащих образцов, а также поглощающих пластин, применяемых в аттенюаторах микроволновой мощности, на добротность рабочего резонатора не влияет.

Учет реальной структуры поля, в частности асимметрии его распределения вдоль вертикальной и горизонтальной осей реального резонатора, позволяет повысить точность определения границ областей с отличающимися магнитно-резонансными характеристиками.

Актуальной является задача о нахождении способов построения резонаторов для метода ЭПР-С с монотонным распределением микроволнового поля в исследуемом образце.

ЛИТЕРАТУРА

1. Суху Р. Магнитные тонкие пленки.— М., 1967.
2. Бабийчук И. П., Гриценко Н. В., Каневский В. С., Пинсуха А. М. А. с. 705322 (СССР).— Опубл. в Б. И., 1979, № 47.
3. Sooh R. F.— J. Appl. Phys., 1962, v. 33, N 3, p. 1276.
4. Линеv В. Н., Фурса Е. Я., Шушкевич С. С.— Положительное решение по заявке № 2946221/25 от 18.12.1980.
5. Зотов Н. И., Линеv В. Н., Фурса Е. Я., Шушкевич С. С.— Положительное решение по заявке № 2954548/25 от 6. 01.1981.
6. Никольский В. В. Электродинамика и распространение радиоволн.— М., 1974.
7. Фихманас Р. Ф., Фридберг П. Ш.— Радиотехника и электроника, 1973, т. 18, № 5, с. 909.
8. Дмитриев В. И., Захаров В. Е.— Вычислительные методы и программирование.— М., 1968, вып. 10, с. 49.
9. Васильев Е. Н., Ильинский А. С., Свешников А. Г.— Вычислительные методы и программирование.— М., 1975, вып. 15, с. 3.
10. Интегральные уравнения. / Под ред. С. Г. Михлина.— М., 1966.
11. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений.— М., 1974.
12. Гринберг Г. И. Избранные вопросы теории электрических и магнитных явлений.— М., 1948.
13. Quinones E., Volino F.— Rev. Sci. Instrum. 1971, v. 42, N 10, p. 1522.
14. Александровский В. И., Куликовских Б. Е., Линеv В. Н. и др.— ПТЭ, 1980, № 2, с. 236.

Кафедра ядерной физики

ПРЯМЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДОКАЗАТЕЛЬСТВА ПОДВИЖНОСТИ ПЕРВИЧНЫХ РАДИАЦИОННЫХ ДЕФЕКТОВ В GaAs

Важнейшей задачей радиационной физики полупроводников является установление природы и свойств вводимых облучением дефектов. Подход к решению этой проблемы тесно связан с вопросом подвижности первичных дефектов при температуре облучения 300 К. Относительно GaAs существуют две точки зрения по данному вопросу. Наблюдаемые экспериментальные результаты авторы [1, 2] объясняют исходя из неподвижности первичных радиационных дефектов (РД), в то время как в работах [3, 4] утверждается, что совокупность экспериментальных результатов может быть объяснена с позиций подвижных первичных дефектов. Вопрос о подвижности первичных дефектов в GaAs до настоящего времени оставался дискуссионным. Не было прямых экспериментальных доказательств в пользу ни одного из этих предположений. Вместе с тем окончательно определить подход к проблеме природы стабильных РД в GaAs невозможно без решения вопроса подвижности первичных РД.

Целью настоящей работы явилось исследование процессов миграции и перераспределения точечных дефектов в GaAs в ходе облучения и последующего термического отжига.

Одним из доказательств подвижности точечных дефектов при заданной температуре может служить изменение каких-либо свойств материала в случае, когда исследуемая область кристалла пространственно удалена от области генерации первичных дефектов. Это можно легко достичь при облучении полупроводниковых структур различного типа частями с малой длиной пробега. В качестве таких структур нами выбраны чистые эпитаксиальные пленки *n*-типа толщиной 15 мкм с высокой степенью совершенства, выращенные на полужолирующих подложках толщиной 250 мкм и электролюминесцентные $p^+ - p - n^+$ структуры с сильнолегированной компенсированной активной областью *p*-типа. Структуры облучались α -частицами с энергией 4,5 МэВ, длина пробега которых в GaAs составляет 20 мкм.

Облучение образцов со стороны эпитаксиальных пленок при $T = 300$ К приводило к уменьшению как концентрации, так и подвижности носителей заряда. Скорость удаления носителей при этом составляла $\sim 10^5$ см⁻¹. После прекращения облучения величина подвижности продолжала изменяться еще в течение 50—60 ч. Анализ показал, что эта длинновременная релаксация не связана с ионизацией кристалла, а обусловлена миграцией первичных дефектов из эпитаксиальной пленки в подложку из-за наличия градиента концентраций. Этот вывод подтвержден результатами облучения эпитаксиальных пленок и электролюминесцентных структур со стороны подложек. В этом случае область генерации дефектов отделена от исследуемой слоем подложки толщиной 150—200 мкм. Тем не менее, в эпитаксиальных пленках наблюдалось уменьшение подвижности носителей заряда, а в электролюминесцентных структурах — квантового выхода и времени жизни (рис. 1). Видно, что в обоих случаях наблюдается насыщение изменений указанных параметров от потока облучения. Это насыщение, по-видимому, связано с уменьшением диффузионной длины первичных РД в области их генерации по мере накопления стабильных дефектов. Действительно, оценки показывают, что насыщение начинает наблюдаться при концентрации стабильных РД в области генерации дефектов $10^{18} - 10^{19}$ см⁻³.

Таким образом, результаты экспериментов согласуются друг с другом и свидетельствуют о подвижности некоторых типов первичных РД в GaAs при комнатной температуре.

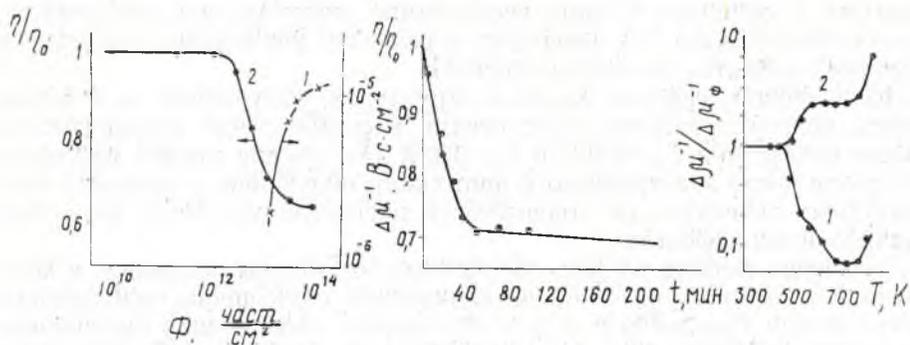


Рис. 1. Изменение подвижности (1) носителей заряда в эпитаксиальном n -GaAs ($T=77$ К) и квантового выхода электролюминесценции (2) в эпитаксиальных $p-n$ структурах на основе GaAs в результате облучения со стороны подложки ($T=300$ К). Температура облучения 300 К

Рис. 2. Изменение внешнего квантового выхода люминесценции $p-n$ структуры, облученной альфа-частицами со стороны эпитаксиального слоя ($T_{\text{обл}}=77$ К) в процессе хранения при $T=300$ К (η_0 — внешний квантовый выход при $T=300$ К до облучения)

Рис. 3. Изменение подвижности носителей заряда при $T=77$ К в ходе изохронного отжига пленок GaAs, облученных альфа-частицами со стороны пленки (1) и подложки (2)

Для определения механизма миграции первичных дефектов проводилось облучение электролюминесцентных структур со стороны p^+ -области при $T=77$ К. Вследствие высокой степени легирования p^+ -области уровень Ферми в ней локализован вблизи V -зоны, и перезарядка первичных дефектов из-за понижения температуры маловероятна. Установлено, что облучение образцов не приводило к уменьшению квантового выхода люминесценции, хотя аналогичное облучение при 300 К давало значительный спад интенсивности люминесценции. При повышении температуры облученных образцов от 77 до 300 К наблюдалась длинновременная релаксация квантового выхода люминесценции (рис. 2). Полученные результаты позволили оценить энергию активации миграции первичных дефектов: ее величина не превышала 0,35 эВ. Тот факт, что миграция первичных РД наблюдалась в компенсированном и сильнолегированном GaAs n - и p -типа проводимости дает возможность заключить, что зарядовое состояние первичных РД не оказывает принципиального влияния на процессы их миграции.

Высокая подвижность первичных дефектов при комнатной температуре обуславливает и их нестабильность, т. е. эти дефекты должны исчезать на стоках, аннигилировать, либо образовывать устойчивые при данной температуре комплексы дефектов. Установленный в данной работе факт высокой подвижности первичных РД при $T=300$ К свидетельствует о том, что основные типы изолированных дефектов в GaAs должны представлять собой комплексы из первичных дефектов, поскольку мелкие легирующие примеси не участвуют в образовании ни центров гашения люминесценции, ни центров компенсации [3, 5].

Исследование процессов отжига РД может дать дополнительную информацию о природе дефектов.

Многочисленные эксперименты свидетельствуют о многообразии типов стабильных РД в GaAs. Особое место среди изолированных дефектов, вводимых при всех видах облучения (исключая нейтронное), занимает группа дефектов, которые исчезают при $T_{\text{отж}}=500$ К, и дающих основной вклад в изменение времени жизни и электропроводности. Однако природа этих дефектов окончательно не установлена, не исследованы процессы аннигиляции и перераспределения точечных дефектов в ходе термического отжига указанных типов дефектов.

В связи с этим представляло интерес сравнить процессы отжига РД,

вводимых в активную область исследуемых структур при α -облучении, с процессами отжига РД, вводимых в условиях равномерной генерации первичных дефектов по объему образцов.

Исследование эффекта Холла в структурах, облученных со стороны пленки, показало наличие двух стадий восстановления электрических свойств пленки при $T_1=500$ К и $T_2=620$ К. Эти стадии отжига наблюдались ранее после электронного и протонного облучения, а характер температурных зависимостей подвижности носителей указывал на отжиг изолированных дефектов.

Изменение свойств пленок, облученных со стороны подложек, в ходе изохронного отжига указывает на дальнейшее уменьшение подвижности носителей при $T_{отж} \geq 500$ К, т. е. в этом случае происходило дальнейшее накопление дефектов (рис. 3). Следовательно, природа дефектов, определяющих основное изменение свойств пленок при различных вариантах облучения, различна. Изменение концентрации и температурных зависимостей подвижных носителей заряда в результате облучения со стороны подложки и последующего отжига указывает на введение областей скопленных дефектов n^+ -типа проводимости.

Совокупность экспериментальных результатов по изменению электрических свойств пленок в ходе отжига свидетельствует о том, что основная часть простейших дефектов, высвобождающихся в результате термической диссоциации основных типов радиационных дефектов при $T \approx 500$ К, аннигилирует или исчезает на стоках, а оставшаяся часть мигрирует на значительные расстояния и оседает на нейтральных скоплениях примесей или включениях второй фазы с образованием n^+ -заряженных областей.

Основные результаты, полученные в работе, сводятся к следующему.

1. Получены прямые экспериментальные доказательства подвижности некоторых типов первичных дефектов при $T=300$ К, оценена их энергия активации миграции.

2. Основные типы стабильных при $T=300$ К изолированных радиационных дефектов представляют собой комплексы из собственных структурных дефектов, образующихся диффузионным путем.

3. Процесс отжига комплексов радиационных дефектов определяется их диссоциацией, при этом основная часть точечных дефектов, освобождающихся в результате диссоциации комплексов, аннигилирует или исчезает на стоках, а незначительная часть участвует в формировании n^+ заряженных включений.

Авторы выражают благодарность Ю. С. Емельяненко за помощь в проведении экспериментов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ланг Д.— В кн.: Точечные дефекты в твердых телах.— М., 1979, с. 187.
2. Арефьев К. П., Брудный В. Н., Будницкий Д. Л., Воробьев С. А., Цой А. А.— ФТП, 1977, т. 13, с. 1142.
3. Ломако В. М., Новоселов А. М.— ФТП, т. 10, с. 900.
4. Сирота Н. Н., Курилович Н. Ф., Гатальский Г. В.— Докл. АН СССР, 1977, т. 232, с. 1062.
5. Кольченко Т. И., Ломако В. М.— ФТП, 1975, т. 9, с. 1757.

НИИ ПФП

УДК 535.44 : 537.868.4

А. П. ХАПАЛЮК

ПОЛНОЕ РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ВОЛН В ОДНОРОДНОМ ШАРЕ

Условия реализации полного резонансного поглощения в однородном шаре могут быть так же подробно изучены, как в слое [1] или в цилиндре [2]. Принципиальная схема постановки задачи стандартная: требуется

найти те решения уравнений Максвелла, которые бы описывали падающие на шар волны вне занимаемого им объема и были бы конечны и ограничены внутри него. Волны, отраженные от поверхности шара, должны отсутствовать. Решение задачи удобно проводить в сферической системе координат ρ, ϑ, φ .

Нужное решение представимо в виде линейной комбинации двух независимых (в соответствии с двумя различными поляризациями) частных решений. Одно из них обычно называется E -волной (отсутствует радиальная составляющая магнитного поля), второе — H -волной (отсутствует радиальная составляющая электрического поля).

Для E -волны общее решение запишется в виде:

$$\begin{aligned} E_\rho &= \frac{l(l+1)}{k\rho V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) P_l^m(\cos\nu) e^{\pm im\varphi}, \\ E_\nu &= \frac{1}{k\rho} \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho)] \frac{d}{d\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{\pm im\varphi}, \\ E_\varphi &= \pm i \frac{m}{k\rho} \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho)] \frac{1}{\sin\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{\pm im\varphi}, \\ H_\rho &= 0, \quad H_\nu = \pm N^2 \frac{m}{V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) \frac{1}{\sin\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{\pm im\varphi}, \\ H_\varphi &= -i N^2 \frac{1}{V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) \frac{d}{d\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{\pm im\varphi}. \end{aligned} \quad (1)$$

Для H -волны решение будет аналогичным:

$$\begin{aligned} E_\rho &= 0, \quad E_\nu = \frac{m}{V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) \frac{1}{\sin\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{im\varphi}, \\ E_\varphi &= i \frac{1}{V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) \frac{d}{d\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{im\varphi}, \\ H_\rho &= \frac{l(l+1)}{k\rho} \frac{1}{V\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho) P_l^m(\cos\nu) e^{im\varphi}, \\ H_\nu &= \frac{1}{k\rho} \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho)] \frac{d}{d\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{im\varphi}, \\ H_\varphi &= i \frac{m}{k\rho} \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} Z_{l+1/2}(kN\rho)] \frac{1}{\sin\nu} P_l^m(\cos\nu) e^{im\varphi}, \end{aligned} \quad (2)$$

где $Z_{l+1/2}(kN\rho)$ — цилиндрическая функция, $P_l^m(\cos\nu)$ — присоединенные полиномы Лежандра, $l = 1, 2, 3, \dots$, $m = 0, \pm 1, \dots, \pm l$.

Решения для областей внутри и вне шара необходимо брать различные. Для внутренней части шара нужно использовать функции Бесселя первого рода, так как только они не имеют особенностей в начале координат. Для области вне шара необходимо взять такие цилиндрические функции, которые бы описывали падающую на поверхность шара волну. Этому условию удовлетворяют функции Ганкеля первого рода. Зависимость от углов ϑ и φ для решения как внутри, так и вне шара должна быть одной и той же.

Общие решения (1)–(2) записаны с точностью до множителя (амплитуды). В дальнейшем их будем считать для падающих на поверхность шара волн заданными и обозначать E_{lm}^a (для E -волны) и H_{lm}^a (для H -волны). Амплитудные множители решений внутри шара обозначаются соответственно через E_{lm}^i и H_{lm}^i , и их определение является дальнейшей целью решения задачи.

Для получения общего решения необходимо решения внутри и вне шара «сшить», чтобы при переходе через границу тангенциальные составляющие полей были непрерывны. Для каждой из волн это требование приводит к четырем уравнениям, из которых только два линейно независимы.

Для E -волны эти два уравнения могут быть записаны в виде

$$N^2 E_{lm}^i J_{l+1/2}(kN\rho_0) - E_{lm}^a H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho_0) = 0, \quad (3)$$

$$E_{lm}^i \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} J_{l+1/2}(kN\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} - E_{lm}^a \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} = 0,$$

где ρ_0 — радиус шара.

Аналогичные уравнения получаются для H -волны:

$$H_{lm}^i J_{l+1/2}(kN\rho_0) - H_{lm}^a H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho_0) = 0, \quad (4)$$

$$H_{lm}^i \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} J_{l+1/2}(kN\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} - H_{lm}^a \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} = 0.$$

Уравнения (3) — (4) следует рассматривать как линейные однородные алгебраические уравнения относительно амплитуд. Они имеют отличные от нуля решения, если определители, составленные из коэффициентов при амплитудах, равны нулю.

Это условие для E -волны требует выполнения равенства

$$H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho_0) \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} J_{l+1/2}(kN\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} - N^2 J_{l+1/2}(kN\rho_0) \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} = 0. \quad (5)$$

Несколько другое равенство получается для H -волны:

$$H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho_0) \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} J_{l+1/2}(kN\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} - J_{l+1/2}(kN\rho_0) \frac{d}{d\rho} [V\sqrt{\rho} H_{l+1/2}^{(1)}(k\rho)] \Big|_{\rho=\rho_0} = 0. \quad (6)$$

Условия (5) — (6) следует считать условиями полного резонансного поглощения волн для шара. Они оказываются для E - и H -волн различными, и, следовательно, явления полного резонансного сопряжения для волн обеих поляризаций одновременно выполняться не могут.

Здесь следует добавить, что с математической точки зрения решение уравнений (5) — (6) относительно неизвестной комплексной величины $kN\rho_0 = k(n - i\kappa)\rho_0$ сводится к нахождению корней целой функции экспоненциального типа. Такие уравнения, как следует из известных теорем Пикара, имеют бесконечный дискретный (счетный) набор комплексных решений. Обозначим эти решения через $kN\rho_0 = \rho_s = \rho_s' - i\rho_s''$ ($s = 0, 1, 2, \dots$) или, разделяя на действительную и мнимую части, получим

$$kn\rho_0 = \rho_s', \quad k\kappa\rho_0 = \rho_s''. \quad (7)$$

Первое равенство в (7) является интерференционным условием полного поглощения, второе — энергетическим.

Легко показать, что условия полного резонансного поглощения (7) фактически те же самые, что и резонансного излучения (генерации). Действительно, при решении задачи на резонансное излучение требуется изменить только решение вне шара: вместо падающих необходимо взять уходящие волны. Это, по существу, означает, что надо взять комплексно сопряженное решение. Кроме того, необходимо перейти от поглощающей к активной среде внутри шара, что математически сводится к изменению знака мнимой части показателя преломления N . В результате для получения условий генерации выражения (5) — (6) необходимо заменить на комплексно сопряженные. Решения таких уравнений также изменятся на комплексно сопряженные, а действительные условия (7) останутся без изменения.

В отличие от условия резонансного поглощения в цилиндре условия резонансного поглощения внутри шара можно изучать более подробно, так как цилиндрические функции полуцелого порядка выражаются через элементарные функции. Для малых значений индекса l (от индекса m они вообще не зависят) условия резонансного поглощения оказываются достаточно простыми.

Начнем это рассмотрение с мод, у которых индекс $l=0$. Эти моды имеют некоторые особенности, так как структура их полей является сфе-

рически симметричной и не зависит от углов θ и φ . Их нельзя получить из общих выражений (1)–(2). Проще исходить непосредственно из уравнений Максвелла. В этом случае решения уравнений Максвелла для внутренней части шара можно записать в виде

$$\begin{aligned} E_\nu &= A^i \frac{\sin k N \rho}{\rho}, \quad H_\varphi = i N A^i \frac{\cos k N \rho}{\rho}, \\ E_\varphi &= B^i \frac{\sin k N \rho}{\rho}, \quad H_\nu = -i N B^i \frac{\cos k N \rho}{\rho}. \end{aligned} \quad (8)$$

Для области вне шара следует взять другие решения

$$\begin{aligned} E_\nu &= A^a \frac{1}{\rho} e^{ik\rho}, \quad H_\varphi = -A^a \frac{1}{\rho} e^{ik\rho}, \\ E_\varphi &= B^a \frac{1}{\rho} e^{ik\rho}, \quad H_\nu = B^a \frac{1}{\rho} e^{ik\rho}. \end{aligned} \quad (9)$$

Сшивая обычным образом эти решения на границах шара, получаем соотношения:

$$\begin{aligned} A_i \sin k N \rho_0 &= A^a e^{ik\rho_0}, \quad i N A^i \cos k N \rho_0 = -A^a e^{ik\rho_0}, \\ B^i \sin k N \rho_0 &= B^a e^{ik\rho_0}, \quad i N B^i \cos k N \rho_0 = -B^a e^{ik\rho_0}. \end{aligned} \quad (10)$$

Условие их разрешимости

$$i N \cos k N \rho_0 + \sin k N \rho_0 = 0 \quad \text{или} \quad \frac{N-1}{N+1} e^{2ikN\rho_0} + 1 = 0 \quad (11)$$

является условием резонансного поглощения нулевой моды. Оно такое же, как условие резонансного поглощения в плоскопараллельном слое [1].

Следующая наиболее низкая мода соответствует значениям индексов $l=1$, $m=0$, и решения для нее могут быть получены из общих выражений (1)–(2). Поля этой моды внутри шара могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} E_\rho &= 2 \frac{\cos \nu}{k \rho^2} f(\rho), \quad E_\nu = -\frac{\sin \nu}{k \rho} \frac{df(\rho)}{d\rho}, \quad H_\varphi = i N^2 \frac{\sin \nu}{\rho} f(\rho), \\ E_\varphi &= i \frac{\sin \nu}{\rho} f(\rho), \quad H_\rho = -2 \frac{\cos \nu}{k \rho^2} f(\rho), \quad H_\nu = \frac{\sin \nu}{k \rho} \frac{df(\rho)}{d\rho}, \\ f(\rho) &= \frac{\sin k N \rho}{k N \rho} - \cos k N \rho. \end{aligned} \quad (12)$$

Решения вне шара получаются из (12) с помощью формальной замены

$$f(\rho) \rightarrow \left(\frac{1}{k \rho} - i \right) e^{ik\rho}, \quad N \rightarrow 1. \quad (13)$$

Требование непрерывности тангенциальных составляющих поля на границе шара приводит к равенствам

$$\begin{aligned} E_{10}^i \left[\left(\frac{\sin k N \rho_0}{k N \rho_0} \right) - \cos k N \rho_0 \right] N^2 &= \left(\frac{1}{k \rho_0} - i \right) e^{ik\rho_0} E_{10}^a, \\ E_{10}^i \frac{d}{d\rho} \left[\frac{\sin k N \rho}{k N \rho} - \cos k N \rho \right] \Big|_{\rho=\rho_0} &= E_{10}^a \frac{d}{d\rho} \left[\left(\frac{1}{k \rho} - i \right) e^{ik\rho} \right] \Big|_{\rho=\rho_0}, \\ H_{10}^i \left(\frac{\sin k N \rho_0}{k N \rho_0} - \cos k N \rho_0 \right) &= H_{10}^a \left(\frac{1}{k \rho_0} - i \right) e^{ik\rho_0}, \\ H_{10}^i \frac{d}{d\rho} \left[\frac{\sin k N \rho}{k N \rho} - \cos k N \rho \right] \Big|_{\rho=\rho_0} &= H_{10}^a \frac{d}{d\rho} \left[\left(\frac{1}{k \rho} - i \right) e^{ik\rho} \right] \Big|_{\rho=\rho_0}, \end{aligned} \quad (14)$$

условия разрешимости которых дают условия полного резонансного поглощения:

для H -волны

$$e^{-2ikN\rho_0} = \frac{kN \rho_0 (N-1) + i(N^2-1)}{kN \rho_0 (N+1) + i(N^2-1)} = \frac{N-1}{N+1} \frac{1 + i \frac{1}{kN \rho_0} (N+1)}{1 + i \frac{1}{kN \rho_0} (N-1)}, \quad (15)$$

и для E -волны

$$e^{-2ikN\rho_0} = -\frac{N-1}{N+1} \frac{1+i(N+1) \frac{1}{kN\rho_0} \left(1 + \frac{i}{kN\rho_0}\right) \left(1 + \frac{i}{k\rho_0}\right)}{1+i(N-1) \frac{1}{kN\rho_0} \left(1 - \frac{i}{kN\rho_0}\right) \left(1 + \frac{i}{k\rho_0}\right)}$$

Условия полного поглощения для моды (1, 0) незначительно отличаются от условий резонансного поглощения в плоскопараллельном слое. Формально отличие сводится к дополнительному множителю, зависящему от $k\rho_0$, который при большом значении $k\rho_0$ стремится к единице. Физическая же интерпретация та же, что и соответствующих условий для плоскопараллельного слоя [1]. Правую часть в выражениях (15) можно интерпретировать как коэффициент отражения от поверхности шара плоской волны, фигурирующей в левой части этих выражений. Кривизна поверхности, измеренная в длинах волн, определяет отличие коэффициентов отражения от френелевских. С уменьшением кривизны поверхности (с увеличением $k\rho_0$) формулы для коэффициентов отражения переходят в формулы Френеля. Такая интерпретация дает возможность результаты исследования резонансного поглощения в плоскопараллельном слое (одномерный случай) просто перефразировать применительно к исследованию резонансного поглощения внутри шара (трехмерный случай).

Условия резонансного поглощения (15) можно интерпретировать также по-другому. Для этого условие для H -волны перепишем в виде:

$$\frac{\left(1 - \frac{i}{kN\rho_0}\right) \frac{1}{kN\rho_0} e^{-ikN\rho_0}}{\left(1 + \frac{i}{kN\rho_0}\right) \frac{1}{kN\rho_0} e^{ikN\rho_0}} = \frac{N-1}{N+1} \frac{1 + \frac{i}{k\rho_0} + \frac{1}{(kN\rho_0)^2} (N+1)}{1 + \frac{i}{k\rho_0} + \frac{1}{(kN\rho_0)^2} (N-1)} \quad (16)$$

В левой части равенства (16) в числителе стоит выражение для бегущей сферической волны (мода 1, 0), в знаменателе — для такой же бегущей сферической волны, распространяющейся в противоположном направлении. В соответствии с обычным определением отношение этих волн, взятых на поверхности шара, естественно назвать амплитудным коэффициентом отражения. Поэтому выражение, стоящее справа, имеет смысл амплитудного коэффициента отражения этой сферической моды от поверхности шара. Этот коэффициент отражения можно считать отношением тангенциальной составляющей электрического либо отношением нормальной составляющей магнитного поля. Оно может быть записано в виде $E_\varphi^*(\rho_0) = R_{10}^M(\rho_0) \cdot E_\varphi^{\prime\prime}(\rho_0)$, где $R_{10}^M(\rho_0)$ — имеет смысл амплитудного коэффициента отражения волны соответствующей моды. В такой записи условия полного резонансного поглощения в слое и внутри шара имеют одинаковый вид и допускают одинаковую физическую интерпретацию.

Аналогичным образом интерпретируется условие резонансного поглощения для E -волны. Амплитудный коэффициент отражения этой волны примет вид

$$R_{10}^E(\rho_0) = -\frac{N-1}{N+1} \frac{(N+1) \left(1 + \frac{i}{k\rho_0}\right) \left[1 + \frac{1}{(kN\rho_0)^2}\right] + (kN\rho_0 - i)}{(N-1) \left(1 + \frac{i}{k\rho_0}\right) \left[1 + \frac{1}{(kN\rho_0)^2}\right] + (kN\rho_0 + i)} \quad (17)$$

Аналогичные результаты можно получить для любых мод, хотя, естественно, результаты с увеличением индекса моды становятся более громоздкими.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хапалюк А. П.— Докл. АН БССР, 1962, т. 6, № 5, с. 301.
2. Хапалюк А. П.— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 2, с. 25.

НИИ ПФП

ОСОБЕННОСТИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ПРИМЕСНОГО ПРОБОЯ В ЭПИТАКСИАЛЬНОМ АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ

В работе изучался низкотемпературный примесный пробой при $T = 4,2$ К в арсениде галлия с концентрацией свободных носителей $n_e = 3,14 \cdot 10^{14} - 1,2 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Исследовались специально нелегированные и легированные мелкой примесью эпитаксиальные пленки n -GaAs, полученные осаждением из газовой фазы на полуизолирующие подложки из арсенида галлия. Омические контакты наносились вжиганием сплава 95% In — 5% Sn в потоке водорода. Вольтамперная характеристика (ВАХ) записывалась при непосредственном погружении образца в жидкий гелий, так что выделяемая мощность не приводила к перегреву и нарушению теплового контакта образца с гелием.

Типичные ВАХ образцов с разной концентрацией мелкой примеси показаны на рис. 1. При концентрации носителей $n_e \leq 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ВАХ линейна до поля низкотемпературного примесного пробоя E_p (кривая 1), при котором наблюдается резкое возрастание тока вследствие ударной ионизации мелкой примеси [1—3]. В образцах с $n_e \geq 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$, как и в германии [4], при $E < E_p$ можно выделить область слабых полей A ($E < E_0$), в которой выполняется закон Ома, и область предпробойных полей B ($E > E_0$), в которой проводимость σ монотонно возрастает (кривая 2). Постоянство проводимости, характерное для области A , очевидно, связано с тем, что в слабых электрических полях концентрация носителей n_e и их подвижность μ не зависят от поля. Рост σ в области B , вообще говоря, может быть связан с увеличением в электрическом поле концентрации носителей в зоне проводимости или их подвижности. Измерение в эпитаксиальном n -GaAs зависимости $\mu(E)$ показало, что в предпробойной области подвижность не зависит от E , а вблизи пробоя даже несколько уменьшается [2, 3]. Анализ температурных зависимостей постоянной Холла $R_H(T)$ показывает, что в исследуемых нами образцах с $n_e \leq 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при $T = 4,2$ К преобладает проводимость по мелким примесям и как $R_H(T)$, так и $R_H(E)$ имеют максимум, характерный для двухзонной модели проводимости [5]. Таким образом, в нашем случае максимум на кривой $R_H(E)$ и нелинейность ВАХ в предпробойных полях можно связать с перераспределением носителей между примесной зоной

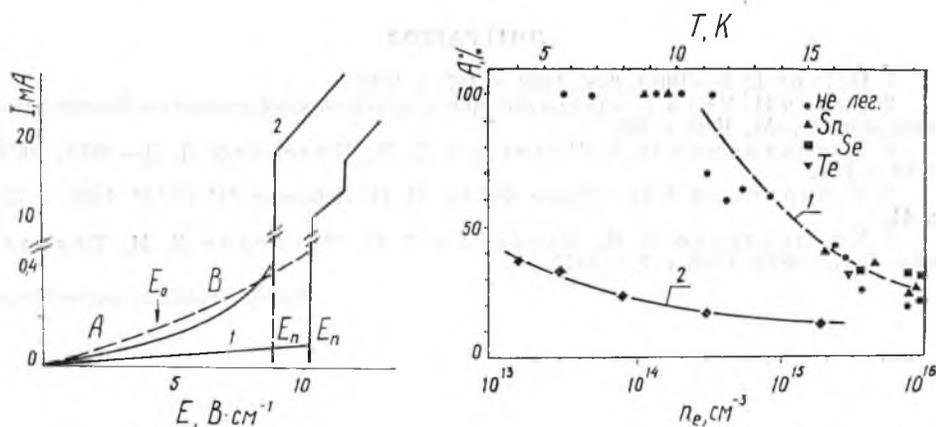


Рис. 1. Вольтамперные характеристики образцов с разной концентрацией носителей при $T = 4,2$ К:

$$1 - n_e = 3,14 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}; \quad 2 - 9,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$$

Рис. 2. Зависимость протяженности области A от концентрации носителей (1) и температуры для образца с $n_e = 9,2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ (2)

и зоной проводимости. Среди возможных известных механизмов увеличения σ (эффект Зинера, уменьшение рекомбинации в электрическом поле, эффект Френкеля) только последний дает качественное согласие с экспериментом при $E < E_{\text{п}}$ (пунктирная линия на рис. 1).

Изучение ВАХ образцов с различным значением n_e позволило установить, что соотношение между областями A и B существенно зависит от концентрации носителей. В отличие от германия, в котором с увеличением избыточной примеси наблюдалось расширение области линейности ВАХ [4], в арсениде галлия нами обнаружено уменьшение протяженности области A с ростом концентрации носителей. Зависимость выраженной в процентах от суммы $A+B$ протяженности области A от n_e показана на рис. 2.

Такое изменение ВАХ n -GaAs с увеличением концентрации примеси, на наш взгляд, отражает факт образования и развития примесной зоны с ростом легирования. При малых концентрациях проводимость обусловлена прыжками электронов по мелким примесным состояниям с низкой «подвижностью», в результате чего закон Ома выполняется до полей $E_{\text{п}}$. С ростом концентрации образуется примесная зона конечной ширины [5], проводимость по ней возрастает. Это позволяет связать максимум на кривой $R_{\text{X}}(E)$ и нелинейность ВАХ в предпробных полях с ее частичной ионизацией наиболее быстрыми электронами. Такая точка зрения подтверждается и трансформацией ВАХ с ростом температуры. Как и следовало ожидать, напряженность поля пробой с ростом температуры уменьшается, пробой становится «мягким» и область B начинается с более слабых электрических полей (см. рис. 2, кривая 2).

Отметим, что на ВАХ ряда образцов наблюдалось два участка с резким возрастанием тока (см. рис. 1, кривая 1). Причем, если при первом пробое ток возрастал на два-три порядка, то при втором в полтора-два раза. Возможными причинами этой особенности ВАХ могут быть либо ударная ионизация более глубокого примесного уровня, либо низкотемпературный примесный пробой в сильнее компенсированном переходном слое между пленкой и подложкой.

Послепробная область ВАХ характеризуется одним наклоном ($\sigma = \text{const}$) до полей, в которых выделяемая в образце мощность приводит к перегреву и нарушению теплового контакта с жидким гелием. При увеличении концентрации мелкой примеси $n_e \gtrsim 3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ВАХ становится линейной, отражая слияние примесной зоны с зоной проводимости и металлический характер переноса заряда.

ЛИТЕРАТУРА

1. Oliver D. J.— Phys. Rev., 1962, v. 127, p. 1045.
2. Асаки И., Хора Т.— Труды 9-й Международной конференции по физике полупроводников,— М., 1969, с. 833.
3. Емельяненко О. В., Наследов Д. Н., Недеогло Д. Д.— ФТТ, 1973, т. 15, с. 1712.
4. Заварицкая Э. И.— Труды ФИ им. П. Н. Лебедева АН СССР, 1966. т. 37, с. 41.
5. Емельяненко О. В., Луганова Т. С., Наследов Д. Н., Талалакин Т. Н.— ФТТ, 1965, т. 7, с. 1315.

Кафедра физики полупроводников



УДК 539.3

И. А. ПРУСОВ, Ю. В. ВАСИЛЕВИЧ

ОБ ОДНОМ ВАРИАНТЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ОБЩИХ ФОРМУЛ ТЕОРИИ УПРУГОСТИ ОРТОТРОПНОГО ТЕЛА

Для решения основных граничных задач теории упругости ортотропного тела необходимо найти выражения компонентов напряжений и перемещений при помощи, по меньшей мере, трех произвольных квазигармонических функций. Решение этой проблемы в столь простой форме, как для трансверсально-изотропного тела, без предположения о существовании некоторого числа зависимостей между коэффициентами упругости, по-видимому, невозможно. Один из подходов к решению такой проблемы при наложении на коэффициенты упругости c_{ij} трех ограничений указан в работе [1].

В настоящей работе получено более простое представление общих формул для напряжений и перемещений в виде суперпозиции двух групп основных формул, для существования которых требуется соответственно три и шесть ограничений на коэффициенты упругости a_{ij} (см. обозначения, принятые в работе [2]).

В отличие от классических представлений предполагается, что $a_{ij} \neq a_{ji}$ при $i \neq j$, т. е. из 12 коэффициентов a_{ij} число независимых коэффициентов, подлежащих определению экспериментальным путем, равно $12-n$, где n — число независимых уравнений связей, налагаемых на коэффициенты a_{ij} .

1. Общие формулы для компонентов напряжений и перемещений. Пусть u, v, w — компоненты перемещений, отнесенные к осям декартовых координат x, y, z ; σ_{ij} и e_{ij} — компоненты напряжений и деформаций, удовлетворяющие уравнениям закона Гука:

$$a_{ij}\sigma_{jj} = e_{ii}, \quad a_{44}\tau_{yz} = e_{yz}, \quad a_{55}\tau_{xz} = e_{xz}, \quad a_{66}\tau_{xy} = e_{xy} \quad (1)$$

и, при отсутствии массовых сил, уравнениям равновесия:

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (i, j = 1, 2, 3). \quad (2)$$

Для удобства записи здесь используются двойные обозначения:

$$\sigma_{11} = \sigma_x, \quad \sigma_{22} = \sigma_y, \quad \dots, \quad \sigma_{12} = \tau_{xy}, \quad e_{xx} = e_{11} = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \dots, \quad e_{xy} = e_{12} = \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y}.$$

Уравнения (2) и (1) для касательных напряжений выполняются, если

$$\begin{aligned} \sigma_x &= A_k \left(\frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial y^2} + \xi_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial z^2} \right), \quad \tau_{xy} = -A_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial x \partial y}, \quad \sigma_y = A_k \left(\frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial x^2} + \eta_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial z^2} \right), \\ \tau_{xz} &= -A_k \xi_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial x \partial z}, \quad \sigma_z = A_k \left(\xi_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial x^2} + \eta_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial y^2} \right), \quad \tau_{yz} = -A_k \eta_k \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial y \partial z}, \\ u &= \frac{1}{2} A_k (\eta_k a_{44} - \xi_k a_{55} - a_{66}) \frac{\partial \Phi_k}{\partial x}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$v = \frac{1}{2} A_k (\xi_k a_{55} - \eta_k a_{44} - a_{66}) \frac{\partial \Phi_k}{\partial y}, \quad w = \frac{1}{2} A_k (a_{66} - \eta_k a_{44} - \xi_k a_{55}) \frac{\partial \Phi_k}{\partial z},$$

где A_k, ξ_k, η_k — произвольные коэффициенты; $\Phi_k = \Phi_k(x_k, y_k, z_k)$ — произвольная гармоническая функция переменных $x_k = \alpha_k x, y_k = \alpha_k \mu_k y, z_k = \alpha_k \lambda_k z$, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2 \Phi_k}{\partial z_k^2} = 0, \quad (4)$$

$\alpha_k, \mu_k, \lambda_k$ — некоторые безразмерные параметры.

Всякую функцию Φ_k , удовлетворяющую уравнению (4), будем называть квазигармонической функцией относительно переменных x, y, z или просто квазигармонической функцией.

Требую, чтобы выражения (3) удовлетворяли уравнениям (1) для нормальных напряжений, получаем три уравнения, на основании которых с учетом (4) следует

$$\begin{aligned} \mu_k^2 &= \frac{a_{12} + \frac{a_{66}}{2} + \xi_k \left(a_{13} + \frac{a_{55}}{2} \right) - \frac{\eta_k a_{44}}{2}}{a_{11} + \eta_k a_{13}} = \\ &= \frac{a_{32} + \xi_k a_{33}}{a_{31} + \eta_k a_{33}}; \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \lambda_k^2 &= \frac{a_{12} + \frac{a_{66}}{2} + \xi_k \left(a_{13} + \frac{a_{55}}{2} \right) - \frac{\eta_k a_{44}}{2}}{\xi_k a_{11} + \eta_k a_{12}} = \\ &= \frac{a_{32} + \xi_k a_{33}}{\xi_k \left(a_{31} + \frac{a_{55}}{2} \right) + \eta_k \left(a_{32} + \frac{a_{44}}{2} \right) - \frac{a_{66}}{2}} = \frac{a_{32} + \xi_k a_{33}}{\xi_k a_{21} + \eta_k a_{22}}. \end{aligned} \quad (6)$$

Умножив числители и знаменатели дробей (6) на A_k , получим систему трех линейных однородных уравнений относительно неизвестных $A_k, A_k \xi_k, A_k \eta_k$. Приравняв затем определитель этой системы к нулю, получаем кубическое уравнение относительно параметра $x = \lambda_k^2$

$$M_0 x^3 - M_1 x^2 + M_2 x - M_3 = 0, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} M_0 &= a_{66} (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}), \\ M_1 &= a_{22} a_{66} (a_{55} + a_{13} + a_{31}) + a_{44} (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}) - a_{66} (a_{12} a_{23} + a_{21} a_{32}), \\ M_2 &= a_{22} a_{44} (a_{55} + a_{13} + a_{31}) + a_{66} (a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32}) - a_{44} (a_{12} a_{23} + a_{21} a_{32}), \\ M_3 &= a_{44} (a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32}). \end{aligned} \quad (8)$$

Уравнение (7) имеет три корня, из которых, по крайней мере, один вещественный. Зафиксируем какой-либо один из них, полагая $x = x_k = \lambda_k^2$ ($k = 1, 2, 3$). Считая x известным, из соотношений (6) получаем систему уравнений для нахождения неизвестных $\xi = \xi_k$ и $\eta = \eta_k$:

$$\begin{aligned} \left(a_{11} x - a_{13} - \frac{a_{55}}{2} \right) \xi + \left(a_{12} x + \frac{a_{44}}{2} \right) \eta &= a_{12} + \frac{a_{66}}{2}, \\ (a_{21} x - a_{23}) \xi + a_{22} x \eta &= a_{22}. \end{aligned} \quad (9)$$

На основании равенств (5) следует, что ξ и η должны удовлетворять также уравнениям

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} a_{33} (a_{55} \xi^2 - a_{44} \xi \eta) + \left[a_{23} a_{31} + \frac{1}{2} a_{32} a_{55} - a_{33} \left(a_{21} + \frac{1}{2} a_{66} \right) \right] \xi + \\ + \left[a_{22} a_{33} - a_{32} \left(a_{23} + \frac{1}{2} a_{44} \right) \right] \eta + a_{22} a_{31} - a_{32} \left(a_{21} + \frac{1}{2} a_{66} \right) &= 0, \\ \frac{1}{2} a_{33} (a_{44} \eta^2 - a_{55} \xi \eta) + \left[a_{11} a_{33} - a_{31} \left(a_{13} + \frac{1}{2} a_{55} \right) \right] \xi + \left[a_{13} a_{32} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} a_{31} a_{44} - a_{33} \left(a_{12} + \frac{1}{2} a_{66} \right) \right] \eta + a_{11} a_{32} - a_{31} \left(a_{12} + \frac{1}{2} a_{66} \right) &= 0. \end{aligned} \quad (10)$$

При этом

$$\mu_k^2 = \frac{a_{32} + \xi_k a_{33}}{a_{31} + \eta_k a_{33}}. \quad (11)$$

Исключая в уравнениях (10) с учетом (9) неизвестные ξ и η , получаем два уравнения 4-й степени относительно x :

$$a_0 x^4 + a_1 x^3 + a_2 x^2 + a_3 x + a_4 = 0, \quad (12)$$

$$b_0 x^4 + b_1 x^3 + b_2 x^2 + b_3 x + b_4 = 0, \quad (13)$$

где $a_0 = k_0 t_5^2$, $a_1 = t_5 (2k_0 t_6 + k_3 t_1 + k_4 t_3)$;

$$a_2 = k_0 (2t_0 t_5 + t_6^2) + t_1 (k_1 t_1 - k_2 t_3) + k_3 (t_1 t_6 - t_2 t_5) + k_4 (t_3 t_6 - t_4 t_5),$$

$$a_3 = 2k_0 t_0 t_6 - 2k_1 t_1 t_2 + k_2 (t_1 t_4 + t_2 t_3) + k_3 (t_0 t_1 - t_2 t_6) + k_4 (t_0 t_3 - t_4 t_6),$$

$$a_4 = t_0 (k_0 t_0 - k_3 t_2 - k_4 t_4) + t_2 (k_1 t_2 - k_2 t_4),$$

$$b_0 = s_0 t_5^2, \quad b_1 = t_5 (2s_0 t_6 + s_3 t_1 + s_4 t_3),$$

$$b_2 = s_0 (2t_0 t_5 + t_6^2) + t_3 (k_2 t_3 - k_1 t_1) + s_3 (t_1 t_6 - t_2 t_5) + s_4 (t_3 t_6 - t_4 t_5),$$

$$b_3 = 2s_0 t_0 t_6 - 2k_2 t_3 t_4 + k_1 (t_2 t_3 + t_1 t_4) + s_3 (t_0 t_1 - t_2 t_6) + s_4 (t_0 t_3 - t_4 t_6),$$

$$b_4 = t_0 (s_0 t_0 - s_3 t_2 - s_4 t_4) + t_4 (k_2 t_4 - k_1 t_2), \quad (14)$$

$$k_0 = a_{22} a_{31} - a_{32} (a_{21} + b_{66}), \quad k_1 = a_{33} b_{55}, \quad k_2 = a_{33} b_{44},$$

$$k_3 = a_{23} a_{31} + a_{32} b_{55} - a_{23} (a_{21} + b_{66}), \quad k_4 = a_{22} a_{33} - a_{32} (a_{23} + b_{44}),$$

$$s_0 = a_{11} a_{32} - a_{31} (a_{12} + b_{66}), \quad s_3 = a_{11} a_{33} - a_{31} (a_{13} + b_{55}),$$

$$s_4 = a_{13} a_{32} + a_{31} b_{44} - a_{33} (a_{12} + b_{66}),$$

$$t_0 = a_{23} b_{44}, \quad t_1 = a_{22} b_{66}, \quad t_2 = a_{22} b_{44}, \quad t_3 = a_{11} a_{22} - a_{21} (a_{12} + b_{66}),$$

$$t_4 = a_{22} (a_{13} + b_{55}) - a_{23} (a_{12} + b_{66}), \quad t_5 = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21},$$

$$t_6 = a_{12} a_{23} - a_{21} b_{44} - a_{22} (a_{13} + b_{55}), \quad b_{ii} = a_{ii}/2, \quad i = 4, 5, 6.$$

Предположим, что уравнения (7), (12) и (13) имеют три общих корня $x = x_k$ ($k=1, 2, 3$). Для их нахождения поступим следующим образом. Умножим уравнение (12) на b_0 и вычтем из полученного уравнения уравнение (13), умноженное на a_0 . В результате получим

$$m_0 x^3 - m_1 x^2 + m_2 x - m_3 = 0. \quad (15)$$

Здесь

$$m_0 = b_0 a_1 - a_0 b_1, \quad m_1 = a_0 b_2 - b_0 a_2, \quad m_2 = b_0 a_3 - a_0 b_3, \quad m_3 = a_0 b_4 - b_0 a_4. \quad (16)$$

Для того чтобы корни уравнений (7) и (15) совпадали, необходимо и достаточно, чтобы

$$m_1 M_0 = m_0 M_1, \quad m_2 M_0 = m_0 M_2, \quad m_3 M_0 = m_0 M_3. \quad (17)$$

Равенства (17) представляют собой три ограничения на коэффициенты a_{ij} . При выполнении этих равенств значения неизвестных $x = x_k$ можно найти, используя уравнение (7). В дальнейшем будем рассматривать только такие ортотропные тела, для которых равенства (17) выполняются. Считая при этом a_{ij} и $x_k = \lambda_k^2$ известными, значения ξ_k , η_k и μ_k найдем из равенств (9) и (11); неопределенным остается лишь параметр α_k . Его значения можно зафиксировать произвольным образом, полагая, например, $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 1$.

При использовании только положительных значений корней

$$\lambda_k = \pm \sqrt{x_k}, \quad \mu_k = \pm \sqrt{\frac{a_{32} + a_{33} \xi_k}{a_{31} + a_{33} \eta_k}} \quad (18)$$

параметров λ_k и μ_k общие формулы для напряжений и перемещений определяются выражениями (3), если считать k индексом суммирования ($k=1, 2, 3$). С учетом всех корней этих параметров получим формулы для напряжений и перемещений:

$$\sigma_x = \left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \xi_k \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) F_k, \quad \sigma_y = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \eta_k \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) F_k, \quad \sigma_z = \left(\xi_k \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \eta_k \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) F_k,$$

$$\tau_{xy} = -\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} F_k, \quad \tau_{xz} = -\frac{\partial^2}{\partial x \partial z} F_k \xi_k, \quad \tau_{yz} = -\frac{\partial^2}{\partial y \partial z} F_k \eta_k, \quad (19)$$

$$u = P_{k1} \frac{\partial}{\partial x} F_k, \quad v = P_{k2} \frac{\partial}{\partial y} F_k, \quad w = P_{k3} \frac{\partial}{\partial z} F_k,$$

где $F_k = A_k \Phi_k + B_k \Omega_k$, $P_{k1} = \frac{1}{2} (\eta_k a_{44} - \xi_k a_{55} - a_{66})$,

$$P_{k2} = \frac{1}{2} (\xi_k a_{55} - \eta_k a_{44} - a_{66}), \quad (20)$$

$$P_{k3} = \frac{1}{2} (a_{66} - \eta_k a_{44} - \xi_k a_{55}),$$

$\Phi_k(a_k x, \alpha_k \mu_k y, \alpha_k \lambda_k z)$ и $\Omega_k(\pm a_k x, \pm \alpha_k \mu_k y, \pm \alpha_k \lambda_k z)$ — произвольные квазигармонические функции переменных x, y, z ; A_k и B_k — произвольные постоянные; k — индекс суммирования.

Для существования упругого состояния тела, определяемого выражениями (19), коэффициенты a_{ij} должны удовлетворять равенствам (17). В предельном случае, когда a_{ij} превращаются в упругие постоянные трансверсально-изотропного тела с шестью зависимостями

$$a_{22} = a_{11}, \quad a_{21} = a_{12}, \quad a_{66} = 2(a_{11} - a_{12}), \quad a_{32} = a_{31}, \quad a_{23} = a_{13}, \quad a_{55} = a_{44}, \quad (21)$$

равенства (17) обращаются в тождества, поскольку при этом все $a_h = 0$. В общем же случае равенства (17) представляют собой три ограничения на коэффициенты a_{ij} . Если значения всех этих коэффициентов найдены экспериментальным путем, равенствами (17) можно воспользоваться как для проверки точности эксперимента, так и для подтверждения или отрицания существования ограничений на коэффициенты a_{ij} , определяемые этими равенствами.

Вместо требования выполнения равенств (17) можно потребовать выполнения уравнений (10) для всех $\xi = \xi_k$ и $\eta = \eta_k$ ($k = 1, 2, 3$). Такой путь приводит к шести ограничениям на a_{ij} , из которых в силу изложенного независимыми будут только три.

2. Общие формулы для ортотропного полупространства. Пусть ортотропное тело занимает область $z > 0$, ограниченную плоскостью S ($z = 0$). Будем предполагать, что плоскость S перпендикулярна к одному из трех главных направлений упругости тела, а упругое состояние тела определяется по формулам (19) при условии, что для всех $k = 1, 2, 3$:

$$\Phi_k = \Phi_k(x, \mu_k y, \lambda_k z), \quad \Omega_k = \Phi_k(x, \mu_k y, -\lambda_k z), \quad (22)$$

где Φ_k и Ω_k — квазигармонические функции в областях $z > 0$ и $z < 0$. При этом, как обычно, будем считать, что оси координат x, y, z образуют правую тройку и параллельны главным направлениям упругости тела.

Поскольку при заданной внешней нагрузке на поверхности тела его упругое состояние зависит от того, какое из главных направлений упругости параллельно оси z , то для полного исследования напряженного состояния тела необходимо рассмотреть три случая. Для каждого из них можно воспользоваться формулами (19) при соответствующем выборе значений коэффициентов a_{ij} . С этой целью можно поступить следующим образом. Пусть, например, закон Гука для главных направлений упругости (1), (2), (3) с ориентацией, показанной на рисунке, имеет вид

$$\begin{aligned} e_{11} &= a'_{11} \sigma_1 + a'_{12} \sigma_2 + a'_{13} \sigma_3, & a'_{44} \tau_{23} &= e_{23}, \\ e_{22} &= a'_{21} \sigma_1 + a'_{22} \sigma_2 + a'_{23} \sigma_3, & a'_{55} \tau_{13} &= e_{13}, \\ e_{33} &= a'_{31} \sigma_1 + a'_{32} \sigma_2 + a'_{33} \sigma_3, & a'_{66} \tau_{12} &= e_{12}, \end{aligned} \quad (23)$$

где e_{ij} и e'_{ij} — компоненты деформаций; σ_i и τ_{ij} — нормальные и касательные напряжения; a'_{ij} — коэффициенты упругости для главных направлений, удовлетворяющие неравенствам $a'_{11} < a'_{22} < a'_{33}$.

В случае, когда ось z параллельна направлению (3), коэффициенты a_{ij} имеют значения, определяемые по формуле $a_{ij} = a'_{ij}$. Если же ось z параллельна направлению (1), то значения a_{ij} получаются циклической перестановкой. Как легко видеть, они определяются выражениями

$$\begin{aligned} a_{1i} &= a'_{2i}, \quad a_{2i} = a'_{3i}, \quad a_{3i} = a'_{1i}, \\ a_{44} &= a'_{55}, \quad a_{55} = a'_{66}, \quad a_{66} = a'_{44}. \end{aligned} \quad (24)$$

Аналогично можно получить значения a_{ij} для случая, когда ось z параллельна главному направлению (2) (см. рисунок).

Поступая таким образом, получим три варианта решения граничных задач для полупространства $z > 0$. По существу они сводятся к рассмотрению упругого равновесия трех ортотропных полупространств с поверхностями S , перпендикулярными к главным направлениям упругости (1), (2), (3). При этом для каждого из таких полупространств выбирается своя система координат x, y, z с осью z , перпендикулярной к поверхности тела S . Более простой путь решения аналогичных задач, не требующий преобразования коэффициентов a_{ij} , получим, считая оси координат x, y, z неизменно связанными с телом и соответственно параллельными осям (1), (2), (3). При этом все сводится к рассмотрению ортотропных полупространств $x > 0, y > 0$ и $z > 0$. Для последнего из них общие формулы определяются выражениями (19) и (22). При рассмотрении полупространств $x > 0$ и $y > 0$ также можно воспользоваться формулами (19), полагая соответственно

$$\Phi_k = \Phi_k(x, \mu_k y, \lambda_k z), \quad \Omega_k = \Phi_k(-x, \mu_k y, \lambda_k z), \quad (25)$$

$$\Phi_k = \Phi_k(x, \mu_k y, \lambda_k z), \quad \Omega_k = \Phi_k(x, -\mu_k y, \lambda_k z), \quad (26)$$

где λ_k и μ_k ($k=1, 2, 3$) — безразмерные параметры, определяемые, как сказано в п. 1.

Формулы (19) имеют место также для бесконечного тела с разрезами на плоскости $z=0$ в предположении, что

$$\Phi_k = \Phi_k(x, \mu_k y, \lambda_k z), \quad \Omega_k = \Omega_k(x, \mu_k y, -\lambda_k z), \quad (27)$$

где Φ_k и Ω_k , в отличие от (22), представляют собой различные квазигармонические функции переменных x, y, z .

Таким образом, выражениями (19) — (27) определяется структура общих формул для ортотропного полупространства и бесконечного ортотропного пространства с разрезами на плоскости $z=0$. Существуют также другие пути построения аналогичных формул. Все они должны удовлетворять принципу предельного перехода, состоящему в том, что при устремлении коэффициентов a_{ij} к соответствующим значениям для изотропного тела параметры λ_k и μ_k для всех k должны принимать значения $\lambda_k = \mu_k = 1$. Ибо только при выполнении этого условия выражения компонентов напряжений и перемещений, найденные в результате решения конкретных граничных задач, превращаются в бигармонические функции при предельном переходе к изотропному телу. Общие формулы, не удовлетворяющие принципу предельного перехода, следует рассматривать как ошибочные или в лучшем случае как приближенные.

3. Общие формулы для трансверсально-изотропного тела. Рассмотрим частный случай ортотропного тела, имеющего плоскость изотропии, перпендикулярную к оси z . Предположим, что между коэффициентами a_{ij} имеют место зависимости (21), но выражение a_{66} неизвестно, и, кроме того, $\xi = \eta$. Тогда на основании уравнений (10) находим $a_{66} = 2(a_{11} - a_{12})$. При этом на основании равенств (6) имеем

$$\lambda^2 = \frac{a_{11} + \xi a_{13}}{\xi(a_{11} + a_{12})} = \frac{a_{31} + \xi a_{33}}{\xi(a_{44} + 2a_{31}) - b_{66}}. \quad (28)$$

Отсюда следует

$$[a_{33}(a_{11}+a_{12})-a_{13}(a_{44}+2a_{31})]\xi^2 + [(a_{31}-a_{13})(a_{11}+a_{12})-a_{11}a_{44}]\xi + a_{11}(a_{11}-a_{12}) = 0. \quad (29)$$

С учетом равенств (5) и (6) находим

$$\mu_k^2 = 1, \quad \lambda_k^2 = \frac{a_{11} + a_{13} \xi_k}{(a_{11} + a_{12}) \xi_k} \quad (k = 1, 2), \quad (30)$$

где ξ_1 и ξ_2 — корни уравнения (29). Будем считать, что x_1 и x_2 — значения $x_k = \lambda_k^2$, определяемые выражениями (30), и представляют собой корни кубического уравнения (7). Тогда третий корень этого уравнения $x_3 = \lambda_3^2$ определяется по формуле

$$x_3 = \frac{a_{44}(a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31})[a_{33}(a_{11} + a_{12}) - a_{13}(2a_{31} + a_{44})]}{a_{11}a_{66}(a_{11} - a_{12})(a_{11}^2 - a_{12}^2)}.$$

Используя уравнения (9), а затем соотношения (5), находим

$$\mu_3^2 = 1, \quad \xi_3 = \eta_3 = \frac{a_{11}}{(a_{11} + a_{12})x_3 - a_{13}}. \quad (31)$$

При этом, если тело занимает область $z > 0$, его упругое состояние определяется выражениями (19), (21) и (22).

Уравнения (1), (2) для трансверсально-изотропного тела с плоскостью изотропии, перпендикулярной к оси z , допускают также без каких-либо ограничений на коэффициенты a_{ij} следующее представление напряжений и перемещений:

$$\begin{aligned} \sigma_x &= -2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} Q_1, \quad \sigma_y = 2 \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} Q_1, \quad \sigma_z = 0, \\ \tau_{xy} &= \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) Q_1, \\ \tau_{xz} &= -\frac{1}{\lambda_0^2} \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} Q_1, \quad \tau_{yz} = \frac{1}{\lambda_0^2} \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} Q_1, \\ u &= -a_{66} \frac{\partial}{\partial y} Q_1, \quad v = a_{66} \frac{\partial}{\partial x} Q_1, \quad w = 0, \end{aligned} \quad (32)$$

где $Q_1 = D_1 \psi_1 + N_1 \omega_1$; $\psi_1 = \psi_1(x, y, \lambda_0 z)$ и $\omega_1 = \omega_1(x, y - \lambda_0 z)$ — произвольные квазигармонические функции, $\lambda_0^2 = a_{44}/a_{66}$, D_1 и N_1 — произвольные постоянные.

Сложив соответственно правые части равенств (19) и (32), получим более общее представление решения уравнений (1) и (2) для трансверсально-изотропного тела.

4. Вторая группа общих формул для ортотропного тела. Обобщением формул (32) на случай ортотропного тела, занимающего область $z > 0$, являются выражения

$$\begin{aligned} \sigma_x &= -n_1 \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x \partial y} + m_3 \frac{\partial^2 Q_2}{\partial y \partial z} + l_2 \frac{\partial^2 Q_3}{\partial x \partial z}, \\ \sigma_y &= n_2 \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x \partial y} - m_1 \frac{\partial^2 Q_2}{\partial y \partial z} + l_3 \frac{\partial^2 Q_3}{\partial x \partial z}, \\ \sigma_z &= n_3 \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x \partial y} + m_2 \frac{\partial^2 Q_2}{\partial y \partial z} - l_1 \frac{\partial^2 Q_3}{\partial x \partial z}, \\ \tau_{xy} &= \left(n_4 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - n_5 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) Q_1 - m_6 \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x \partial z} + l_7 \frac{\partial^2 Q_3}{\partial y \partial z}, \\ \tau_{xz} &= -n_6 \frac{\partial^2 Q_1}{\partial y \partial z} + m_7 \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x \partial y} + \left(l_4 \frac{\partial^2}{\partial z^2} - l_5 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) Q_3 \\ \tau_{yz} &= n_7 \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x \partial z} + \left(m_4 \frac{\partial^2}{\partial y^2} - m_5 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) Q_2 - l_6 \frac{\partial^2 Q_3}{\partial x \partial y}, \\ u &= -a_{66} \frac{\partial Q_1}{\partial y} + l_8 a_{55} \frac{\partial Q_3}{\partial z}, \\ v &= n_8 a_{66} \frac{\partial Q_1}{\partial x} - a_{44} \frac{\partial Q_2}{\partial z}, \end{aligned} \quad (33)$$

$$\omega = m_8 a_{44} \frac{\partial Q_2}{\partial y} - a_{55} \frac{\partial Q_3}{\partial x},$$

где $Q_k = D_k \psi_k + N_k \omega_k$ ($k=1, 2, 3$); $\psi_k(x, \mu_0 y, \lambda_0 z)$, $\omega_1(x, \mu_0 y, -\lambda_0 z)$, $\omega_2(-x, \mu_0 y, \lambda_0 z)$, $\omega_3(x, -\mu_0 y, \lambda_0 z)$ — произвольные квазигармонические функции; $n_i, m_i, l_i, D_k, N_k, \lambda_0, \mu_0$ — произвольные постоянные. Полагая в формулах (33) $Q_2 = Q_3 = 0$ и удовлетворяя уравнениям (1) и (2), получаем значения коэффициентов n_i в форме

$$\begin{aligned} n_1 &= \frac{a_{66}(a_{12}n_8 + a_{22}) + (n_8\beta_{64} - \beta_{65})(a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13})}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}, \\ n_2 &= \frac{a_{66}(a_{11}n_8 + a_{21}) + (n_8\beta_{64} - \beta_{65})(a_{11}a_{23} - a_{21}a_{13})}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}, \\ n_8 &= \frac{\beta_0\beta_{45} + a_{44}a_{21}(a_{21}a_{32} - a_{22}a_{31})}{\beta_0 + a_{44}a_{21}(a_{12}a_{31} - a_{11}a_{32})}, \\ n_4 &= n_8, \quad n_3 = n_6 - n_7, \\ n_5 &= 1, \quad n_6 = \beta_{65}, \quad n_7 = n_8\beta_{64}, \end{aligned} \quad (34)$$

где $\beta_{ij} = a_{ij}/a_{jj}$ ($i, j=4, 5, 6$), $\beta_0 = (a_{11}a_{23} - a_{21}a_{13})(a_{22}a_{31} - a_{21}a_{32}) - (a_{23}a_{31} - a_{33}a_{21})(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})$.

Значения m_i и l_i для $i=1, 2, 3, 8$ получаются однократной циклической заменой индексов коэффициентов a_{ij} в выражениях n_i и m_i с соответствием по схеме

$$n_i \rightarrow m_i \rightarrow l_i \rightarrow n_i \quad (i=1, 2, 3, 8). \quad (35)$$

Согласно этой схеме значения m_i и l_i получаются соответственно на основании выражений n_i и m_i при однократной замене индексов a_{ij} по правилу: $a_{11} \rightarrow a_{22} \rightarrow a_{33} \rightarrow a_{11}$, $a_{44} \rightarrow a_{55} \rightarrow a_{66} \rightarrow a_{44}$, $a_{12} \rightarrow a_{23} \rightarrow a_{31} \rightarrow a_{12}$, ...

Все остальные значения коэффициентов m_i, l_i и λ_0, μ_0 определяются по формулам:

$$\begin{aligned} m_4 &= m_8, \quad m_3 = m_6 - m_7, \quad m_5 = 1, \quad m_6 = \beta_{46}, \quad m_7 = m_8\beta_{45}; \\ l_4 &= l_8, \quad l_3 = l_6 - l_7, \quad l_5 = 1, \quad l_6 = \beta_{54}, \quad l_7 = l_8\beta_{56}; \\ \lambda_0^2 &= a_{44}/a_{66} = \beta_{46}, \quad \mu_0^2 = a_{44}/a_{55} = \beta_{45}. \end{aligned} \quad (36)$$

При этом формулы (33) имеют место, если a_{ij} удовлетворяют уравнениям:

$$\begin{aligned} n_1 - n_8 &= \beta_{45}, \quad n_2 - 1 = n_8\beta_{54}, \quad m_1 - m_8 = \beta_{56}, \\ m_2 - 1 &= m_8\beta_{65}, \quad l_1 - l_8 = \beta_{64}, \quad l_2 - 1 = l_8\beta_{46}, \end{aligned} \quad (37)$$

представляющим шесть ограничений на упругие постоянные a_{ij} .

Путем наложения решений (19) и (33) получим самое общее представление для напряжений и перемещений ортотропного тела. Для его существования необходимо, чтобы коэффициенты a_{ij} удовлетворяли 9 ограничениям в форме равенств (17) и (37).

В случае трансверсально-изотропного тела равенства (17) и два из равенств (37) в силу соотношений (21) обращаются в тождества. Поскольку при этом $l_8 = 1/m_8$, $l_1 = m_2/m_8$, $l_2 = m_1/m_8$, то из всех остальных равенств (37) независимыми будут

$$m_1 - m_8 = \beta_{46}, \quad m_2 - m_8\beta_{64} = 1. \quad (38)$$

Используя формулы (19) и (33), можно получить решения основных граничных задач для упругого ортотропного полупространства и ортотропного пространства с разрезами на плоскости $z=0$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Купрадзе В. Д., Гегелия Т. Г., Башелейшвили М. О., Бурчуладзе Т. В. Трехмерные задачи математической теории упругости. — Тбилиси, 1968.
2. Лехницкий С. Г. Теория упругости анизотропного тела. — М., 1977.

Кафедра теоретической механики

АДАПТИВНОЕ ОЦЕНИВАНИЕ ПРИ ЗАВИСИМЫХ ВЫБОРКАХ

Будем рассматривать задачу оценивания неизвестных параметров в регрессионной задаче, когда эти параметры линейно связаны с наблюдениями (выборочными значениями).

$$y_t = \sum_{k=1}^n c_k \varphi_k(t) + \xi_t = \varphi^*(t) c + \xi_t. \quad (1)$$

Здесь и ниже пользуемся следующими обозначениями:

c — вектор-столбец неизвестных параметров, значения которых нужно оценить в процессе идентификации; n — размерность вектора c ; $c^* = (c_1, c_2 \dots c_n)$, * — знак транспонирования; y_t — наблюдение выходной переменной в момент времени t , t — дискретное время ($t=1, 2, \dots$); $\varphi^*(t) = (\varphi_1(t) \varphi_2(t) \dots \varphi_n(t))$ — известный вектор; ξ_t — аддитивный шум с нулевым математическим ожиданием $M\{\xi_t\} = 0$ и корреляционной функцией $M\{\xi_k \xi_t\} = \rho(k, t)$. Дисперсию ξ_t обозначим ρ_t . Пусть также $y^*(N) = (y_1 y_2 \dots y_N)$ — N -вектор наблюдений; $\Phi^*(N) = (\varphi(1) \varphi(2) \dots \varphi(N))$ — известная матрица размера $(n \times N)$; $\xi^*(N) = (\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N)$ — N -вектор шумов.

Тогда наблюдения в течение интервала времени $1 \leq t \leq N$ запишутся в матричной форме

$$y(N) = \Phi(N) c + \xi(N). \quad (2)$$

При этом $M\{\xi(N) \xi^*(N)\} = R(N)$ будет обозначать матрицу корреляции шумов. $R(N) = \|\rho(k, t)\|$, $1 \leq k, t \leq N$. Обозначим также $r^*(N) = (\rho(1, N) \rho(2, N) \dots \rho(N-1, N))$ — $(N-1)$ — вектор корреляций.

Адаптивная идентификация методом наименьших квадратов (МНК). Наиболее полное исследование адаптивной процедуры оценивания методом наименьших квадратов при использовании независимых наблюдений провели Алберт и Ситлер в работе [1]. Мы распространим их результаты на случай зависимых наблюдений. В этой работе описана адаптивная процедура вычисления оценок вектора c из (2) в предположении, что матрица корреляции $R(N)$ диагональная. Чтобы использовать эти результаты в нашем случае, преобразуем (2) таким образом, чтобы были выполнены условия работы [1]. Введем в рассмотрение матрицу $D(t)$, $1 \leq t \leq N$, определяемую рекуррентно соотношениями

$$D(1) = 1, D(t+1) = \begin{pmatrix} D(t) & 0 \\ d(t+1) & \delta_{t+1} \end{pmatrix}, 1 \leq t \leq N, \quad (3)$$

где $\delta_{t+1} = (\rho_{t+1} - r^*(t+1) R^{-1}(t) r(t+1))^{-1/2}$; $d(t+1) = -\delta_{t+1} r^*(t+1) R^{-1}(t)$.

Обозначим $\tilde{y}(t) = D(t) y(t)$, $\tilde{\Phi}(t) = D(t) \Phi(t)$, $\tilde{\xi}(t) = D(t) \xi(t)$, $1 \leq t \leq N$.

Непосредственные вычисления показывают, что $\tilde{R}(t) = M\{\tilde{\xi}(t) \tilde{\xi}^*(t)\} = D(t) R(t) D^*(t) = I$, где I — единичная матрица соответствующего размера. Таким образом, умножая (2) слева на $D(N)$, получим соотношение

$$\tilde{y}(N) = \tilde{\Phi}(N) c + \tilde{\xi}(N), \quad (4)$$

в котором компоненты вектора $\tilde{\xi}(N)$ попарно некоррелированы. Заметим, что введенное матричное преобразование обладает необходимым для построения адаптивной процедуры свойством: $\tilde{y}^*(t+1) = (\tilde{y}^*(t) \tilde{y}_{t+1})$, $\tilde{\Phi}^*(t+1) = (\tilde{\Phi}^*(t) \tilde{\varphi}(t+1))$, $\tilde{\xi}^*(t+1) = (\tilde{\xi}^*(t), \tilde{\xi}_t)$. Здесь $\tilde{y}_{t+1} = d(t+1) y(t) + \delta_{t+1} y_{t+1} = \delta_{t+1} (y_{t+1} - r^*(t+1) R^{-1}(t) y(t))$; $\tilde{\varphi}(t+1) = \Phi^*(t) d^*(t+1) + \delta_{t+1} \varphi(t+1) = \delta_{t+1} (\varphi(t+1) - \Phi^*(t) R^{-1}(t) r(t+1))$; $\tilde{\xi}(t+1) = d(t+1) \xi(t) + \delta_{t+1} \xi_{t+1} = \delta_{t+1} (\xi_{t+1} - r^*(t+1) R^{-1}(t) \xi(t))$.

Используя для построения адаптивной оценки параметров c из (4) результаты [1], можно убедиться, что справедлива

Теорема 1. Если компоненты вектора шума в (2) коррелированы, то адаптивная оценка МНК имеет вид

$$c(N) = c(N-1) + \gamma(N) [y_N - r^*(N) R^{-1}(N-1) y(N-1) - \psi^*(N) c(N-1)]. \quad (5)$$

Здесь $\psi(N) = \varphi(N) - \Phi^*(N-1) R^{-1}(N-1) r(N)$, а коэффициент влияния $\gamma(N)$ вычисляется по формуле

$$\gamma(N) = \begin{cases} \frac{a(N)}{\psi^*(N) a(N)}, & \text{если } a(N) \neq 0 \\ \frac{b(N)}{\sigma_N^2 + \psi^*(N) b(N)}, & \text{если } a(N) = 0, \end{cases} \quad (6)$$

где $\sigma_N^2 = \rho_N - r^*(N) R^{-1}(N-1) r(N)$; $a(N) = A(N-1) \psi(N)$ — n -вектор; $b(N) = B(N-1) \psi(N)$ — n -вектор, а $(n \times n)$ — матрицы A и B удовлетворяют рекуррентным соотношениям.

$$A(N) = \begin{cases} A(N-1) - \frac{a(N) a^*(N)}{\psi^*(N) a(N)}, & \text{если } a(N) \neq 0, \\ A(N-1), & \text{если } a(N) = 0; \end{cases} \quad (8)$$

$$B(N) = \begin{cases} B(N-1) - \frac{b(N) a^*(N) + a(N) b^*(N)}{\psi^*(N) a(N)} + \\ + \frac{\sigma_N^2 + \psi^*(N) b(N)}{(\psi^*(N) a(N))^2} a(N) a^*(N), & \text{если } a(N) \neq 0, \\ B(N-1) - \frac{b(N) b^*(N)}{\sigma_N^2 + \psi^*(N) b(N)}, & \text{если } a(N) = 0. \end{cases} \quad (10)$$

$A(0) = I$. Если априорные данные о параметрах отсутствуют, то $c(0) = 0$, $B(0) = 0$.

Заметим, что условие $a(N) \neq 0$ необходимо и достаточно для того, чтобы вектор $\psi(N)$ не являлся линейной комбинацией векторов $\psi(1)$, $\psi(2)$, ..., $\psi(N-1)$. Отсюда следует, что в процессе построения оценок вектора c по текущим данным, каково бы ни было N , формулы (6), (8) и (10) используются не более, чем n раз.

Пусть $\varphi_k(t)$, $1 \leq k \leq n$, образуют набор линейно независимых функций. В этом случае, как правило (этому можно дать строгое обоснование), первые n строк матрицы $\Phi(N)$, $N > n$, являются линейно независимыми. И процедура оценивания строится по следующему правилу: первые n оценок $c(t)$, $1 \leq t \leq n$ вычисляются с использованием (6), (8), (10), а последующие вычисления используют только (7) и (11), так как матрица $A(t)$ уже больше не нужна. Этот второй режим адаптивного оценивания при коррелированных наблюдениях ранее найден Аведьяном [2], использовавшим другую технику анализа.

Адаптивная идентификация типа стохастической аппроксимации. Вычислительные сложности адаптивных оценок МНК часто служат препятствием к их применению. Существенно более простыми являются оценки, построенные по типу стохастической аппроксимации (оценки ТСА), которые для рассматриваемой задачи имеют вид

$$c(N) = c(N-1) + \gamma(N) (y_N - \varphi^*(N) c(N-1)). \quad (12)$$

Сходимость (12) для независимых наблюдений обеспечивают коэффициенты влияния, выбираемые просто [3]:

$$\gamma(N) = a\varphi(N)/N. \quad (13)$$

Объем памяти необходимой информации и число арифметических операций на каждой итерации имеют порядок n независимо от того, коррелированы или нет наблюдения. Конечно, за счет простоты оценка (12), (13) теряет в эффективности по сравнению с (5) — (11). К сожалению,

не представляется возможным аналитически определить ухудшение качества оценки при переходе от (5)—(11) к (12), (13). Здесь уместно заметить, что оценка ТСА может оказаться все-таки предпочтительней, чем оценка МНК, так как за одно и тоже время при вычислениях по (12), (13) можно сделать в (N^2/n) раз больше итераций, чем при применении (5)—(11).

Для одной из оценок ТСА, описанной ниже, в [4] экспериментально установлены области такой предпочтительности.

Удобно след матрицы вариаций оценок выбрать в качестве меры их эффективности, так как он совпадает с суммой дисперсий компонент вектора оценок. Оценка (12) может быть улучшена, если коэффициент влияния выбрать оптимальным образом: так, чтобы след матрицы вариаций был минимальным. Пусть

$$H(N) = M\{(c(N) - c)(c(N) - c)^*\}, \quad h_N = \text{tr } H(N). \quad (14)$$

Теорема 2 [5]. Если компоненты вектора шума в (2) коррелированы, то коэффициент влияния $\gamma(N)$ адаптивной оценки ТСА в (12), минимизирующий h_N , вычисляется по формуле

$$\gamma(N) = \frac{H(N-1)\varphi(N) - \lambda(N)}{\rho_N - \varphi^*(N)H(N-1)\varphi(N) - 2\varphi^*(N)\lambda(N)}, \quad (15)$$

где $\lambda(N) = L(N-1)r(N)$, а $(n \times N)$ — матрица L определяется рекуррентно

$$L(1) = \gamma(1), \quad L(N) = ((I - \gamma(N)\varphi^*(N))L(N-1) : \gamma(N)). \quad (16)$$

$\lambda(1) = 0$, если наблюдения некоррелированы с априорными оценками.

Матрица вариаций $H(N)$ в этом случае рекуррентно вычисляется соотношением

$$H(N) = H(N-1) - \frac{(H(N-1)\varphi(N) - \lambda(N))(H(N-1)\varphi(N) - \lambda(N))^*}{\rho_N + \varphi^*(N)H(N-1)\varphi(N) - 2\varphi^*(N)\lambda(N)}, \quad (17)$$

Априорная оценка $c(0)$ и ее матрица вариаций $H(0)$ считаются заданными.

Сложность алгоритма (12), (15)—(17) такова: для выполнения одной итерации необходимо выполнить порядка Nn арифметических операций. Более точные сведения о сложности алгоритмов (12), (13) и (15)—(17) содержатся в [4].

О состоятельности адаптивных оценок по коррелированным наблюдениям. Наличие корреляции между наблюдениями обычно ухудшает качество оценок. Поэтому возможны ситуации, когда корреляция между наблюдениями не позволяет построить состоятельную оценку. Рассмотрим эту проблему на примере скалярного случая оценивания математического ожидания. В этом случае $n=1$, $\varphi(t) = 1$ для всех t и

$$y_t = c + \xi_t, \quad t \geq 1. \quad (18)$$

Рассмотрим вначале оценку МНК. Обозначим через e вектор соответствующей размерности, составленный из единиц $e = (1 \dots 1)$. Пусть

$$\varepsilon_1 = 1, \quad \varepsilon_t = 1 - eR^{-1}(t-1)r(t), \quad t > 1. \quad (19)$$

Тогда оценка МНК параметра c в соответствии с (5) имеет вид

$$c_t = c_{t-1} + \gamma_t(y_t - r^*(t)R^{-1}(t-1)y(t-1) - \varepsilon_t c_{t-1}). \quad (20)$$

Из соотношений (6)—(11) получаем $a(1) = 1$, $a(t) = 0$, $t > 1$, $b(1) = 0$, $b(t) = b_{t-1}\varepsilon_t$, $t > 1$, $b_1 = \rho_1 = \sigma_1^2$ и имеют место рекуррентные соотношения

$$b_t = \sigma_t^2 b_{t-1} / (\sigma_t^2 + \varepsilon_t^2 b_{t-1}), \quad \gamma_t = \varepsilon_t b_{t-1} / (\sigma_t^2 + \varepsilon_t^2 b_{t-1}), \quad \gamma_1 = 1 \quad (21)$$

σ_t^2 было определено ранее.

Оценим дисперсию оценки (20). Пусть $\eta_t = c_t - c$. Тогда

$$\eta_t = \xi_t, \quad \eta_t = (1 - \gamma_t \varepsilon_t) \eta_{t-1} + \gamma_t (\xi_t - r^*(t)R^{-1}(t-1)\xi(t-1)). \quad (22)$$

Введем в рассмотрение t — вектор-строку $q(t)$, определив ее рекуррентным соотношением

$$q(t) = ((1 - \gamma_t \varepsilon_t) q(t-1) - \gamma_t r^*(t) R^{-1}(t-1) \gamma_t), \quad q(1) = 1. \quad (23)$$

Легко убедиться, что $\eta_t = q(t) \xi(t)$, поэтому дисперсия оценки (20)

$$h_t = D\{c_t\} = M\{\eta_t^2\} = q(t) R(t) q^*(t). \quad (24)$$

Используя (23), можно придать (24) рекуррентную форму и с ее помощью вычислить дисперсию в явном виде

$$h_t = (1 - \gamma_t \varepsilon_t)^2 h_{t-1} + \gamma_t^2 \sigma_t^2 = \gamma_t^2 \sigma_t^2 + \sum_{k=1}^{t-1} \gamma_k^2 \sigma_k^2 \prod_{l=k+1}^t (1 - \gamma_l \varepsilon_l). \quad (25)$$

Обозначим

$$u_t = \frac{\varepsilon_t^2}{\sigma_t^2} = \frac{(1 - eR^{-1}(t-1)r(t))^2}{\rho_t - r^*(t)R^{-1}(t-1)r(t)}. \quad (26)$$

Из (21) следует

$$b_t = 1/(1/b_{t-1} + u_t) = 1/\sum_{k=1}^t u_k \quad (27)$$

и далее

$$\gamma_t^2 \sigma_t^2 = u_t / \left(\sum_{k=1}^t u_k \right)^2, \quad 1 - \gamma_t \varepsilon_t = \sum_{k=1}^{t-1} u_k / \sum_{k=1}^t u_k. \quad (28)$$

Используя это, получаем дисперсию h_t в виде

$$h_t = b_t = 1/\sum_{k=1}^t u_k. \quad (29)$$

Теорема 3. Для того чтобы оценка МНК (20) была состоятельной, необходимо и достаточно, чтобы ряд $\sum_{k=1}^t u_k$ расходился при $t \rightarrow \infty$.

Отсюда можно установить некоторые полезные следствия. Пусть шум ξ является марковским с дисперсией σ^2 и параметром $\rho(t, t+1) = \rho \leq 1$.

Тогда $u_t = (1 - \rho)/\sigma^2(1 + \rho)$ для всех t . Ряд $\sum_{k=1}^t u_k$ расходится для всех $\rho < 1$ и дисперсия оценки МНК $h_t = \sigma^2 \frac{1 + \rho}{1 - \rho} \frac{1}{t} \xrightarrow{t \rightarrow \infty} 0$.

Пусть теперь шум ξ некоррелирован. Тогда для состоятельности оценки МНК получаем необходимое условие, ограничивающее рост дисперсии шума со временем: $\lim_{t \rightarrow \infty} \left(\sum_{k=1}^t 1/\rho_k \right)^{-1} = 0$.

Рассмотрим теперь оценку ТСА (12) с коэффициентом влияния $\gamma_t = a/t$. Подобно (16) введем t — вектор-строку $l(t)$ рекуррентным соотношением

$$l(1) = a, \quad l(t) = ((1 - a/t)l(t-1) \ a/t), \quad t > 1. \quad (30)$$

Тогда $\eta_t = c_t - c = \pi_{1t}(a) \eta_0 + l(t) \xi(t)$, где $\pi_{1t}(a) = (1 - a/t)(1 - a/(t-1)) \dots (1 - a/2)(1 - a)$.

Дисперсия оценки (12) имеет вид $h_t = \pi_{1t}^2(a) h_0 + l(t) R(t) l^*(t)$. Здесь h_0 — дисперсия априорной оценки. Используя рекуррентное соотношение (30), получаем

$$\begin{aligned} h_t &= (1 - a/t)^2 h_{t-1} + 2(1 - a/t) \frac{a}{t} l(t-1) r(t) + \frac{a^2}{t^2} \rho_t = \\ &= \pi_{1t}^2(a) h_0 + \frac{a}{t} \left(\Theta_t + \sum_{k=1}^{t-1} \Theta_k \prod_{l=k+1}^t \beta_l \right). \end{aligned} \quad (31)$$

Здесь $\Theta_t = \frac{a}{t} \rho_t + 2 \left(1 - \frac{a}{t}\right) l(t-1) r(t)$; $\beta_t = \frac{l}{l-1} (1 - a/l)^2$.

Теорема 4. Пусть выполнены условия

$$\gamma_t = a/t \quad a \geq 1, \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t^2} \sum_{k=1}^t \rho_k = 0. \quad (32)$$

Для того чтобы оценка (18) была состоятельной, достаточно, чтобы

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t^2} \sum_{k=2}^t (k-a) l(k-1) r(k) = 0. \quad (33)$$

При доказательстве (33) существенно используется тот факт, что при

$$a \geq 1, \quad k < t \quad \prod_{l=k+1}^t \beta_l \leq \frac{k}{t}.$$

Заметим, что при $a=1$ (12) превращается в выборочное среднее, а (33) в известное условие состоятельности выборочного среднего при коррелированных наблюдениях:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t^2} \sum_{k=2}^t \sum_{l=1}^{k-1} \rho(l, k) = 0.$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Albert A, Sittler R. W.—J. SIAM Control, 1966, Ser. A, v. 3, N 3, p. 384.
2. Аведьян Э. Д.—Автоматика и телемеханика, 1975, № 5, с. 67.
3. Цыпкин Я. З. Основы теории обучающих систем.—М., 1970.
4. Медведев Г. А., Хацкевич Г. А.—Автоматика и телемеханика, 1979, № 8, с. 69.
5. Медведев Г. А.—Автоматика и телемеханика, 1974, № 5, с. 110.

*Кафедра теории вероятностей
и математической статистики*

УДК 517.544.8.545

Э. И. ЗВЕРОВИЧ

ЗАДАЧА КАРЛЕМАНА НА РИМАНОВОЙ ПОВЕРХНОСТИ С КРАЕМ И ОТОБРАЖЕНИЕ КРУГОВЫХ МНОГОУГОЛЬНИКОВ

1. Пусть M — конечная ориентируемая риманова поверхность рода $h \geq 0$ с гладким краем ∂M , который предположим связным и ориентированным. Пусть $\alpha(t)$ — изменяющий ориентацию гомеоморфизм края ∂M на себя, удовлетворяющий тождеству $\alpha[\alpha(t)] \equiv t$ и такой, что дифференциал $d\alpha(t)$ H -непрерывен и нигде не обращается в нуль.

Задача Карлемана в ее простейшей постановке (задача о скачке) требует нахождения всех функций $\Phi(z)$, аналитических на $M \setminus \partial M$, H -непрерывно продолжимых на ∂M , где должно выполняться краевое условие:

$$\Phi[\alpha(t)] - \Phi(t) = g(t), \quad t \in \partial M. \quad (1)$$

Здесь $g(t)$ — заданная H -непрерывная функция, удовлетворяющая тождеству $g[\alpha(t)] + g(t) \equiv 0$ на ∂M .

С точки зрения разрешимости задача (1) полностью исследована [1]; ее разрешимость равносильна выполнению равенств

$$\int_{\partial M} g(t) d\Psi[\alpha(t)] = 0, \quad (2)$$

где $d\Psi$ — любой аналитический на $M \setminus \partial M$ дифференциал, H -непрерывно продолжимый на ∂M , где должно выполняться равенство

$$d\Psi(t) = d\Psi[\alpha(t)]. \quad (3)$$

Если условия (2) выполнены, то задача (1) разрешима, а ее общее реше-

ние равно любому ее частному решению плюс произвольная комплексная постоянная.

Задача (3) имеет h линейно независимых решений, и, таким образом, условия (2) можно записать в виде системы h независимых уравнений. Если $h=0$, то задача (1) разрешима безусловно.

Проблема вычисления решений задачи (1) связана с проблемой вычисления основных функционалов замкнутой римановой поверхности S , полученной из M с помощью локально-конформного склеивания точек t и $\alpha(t)$ края.

Если $M \subset R$, где R — замкнутая риманова поверхность, основные функционалы которой известны, то задачу (1) можно свести к интегральному уравнению Фредгольма и тем самым получить некоторый способ построения ее решений. Этот подход позволяет дать эффективное решение некоторых задач отображения круговых многоугольников, не требующее вычисления аксессуарных параметров [2] и поэтому представляющее не только практический, но и теоретический интерес.

2. Пусть $R = \hat{C}$ — расширенная комплексная плоскость; $M \setminus \partial M$ — односвязная область, содержащая точку ∞ . Функцию $\Phi(z)$, аналитическую на $M \setminus \partial M$ и H — непрерывно продолжимую на ∂M , можно искать в виде интеграла типа Коши

$$\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial M} \frac{\varphi(\tau)}{\tau - z} d\tau + C, \quad (4)$$

с неизвестной плотностью $\varphi(t)$, удовлетворяющей тождеству $\varphi(t) + \varphi[\alpha(t)] \equiv 0$. В самом деле, при $t \in \partial M$ имеем

$$\Phi^+(t) - \Phi^-(t) = \varphi(t), \quad \Phi^+[\alpha(t)] - \Phi^-[\alpha(t)] = \varphi[\alpha(t)]. \quad (5)$$

Складывая эти равенства и учитывая, что $\varphi(t) + \varphi[\alpha(t)] \equiv 0$, имеем

$$\Phi^+(t) - \Phi^-(t) + \Phi^+[\alpha(t)] - \Phi^-[\alpha(t)] \equiv 0$$

или

$$\Phi^+[\alpha(t)] + \Phi^+(t) = \Phi^-[\alpha(t)] + \Phi^-(t).$$

Считая правую часть известной, получаем относительно функции $\Phi^+(z)$ задачу Карлемана, которая, как известно [3], разрешима безусловно. Тогда $\varphi(t)$ можно вычислить по формуле (4).

С помощью представления (4) сведем задачу (1) к интегральному уравнению. Имеем:

$$\begin{aligned} \Phi^-(t) &= -\frac{1}{2} \varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial M} \frac{\varphi(\tau)}{\tau - t} d\tau + C, \\ \Phi^-[\alpha(t)] &= -\frac{1}{2} \varphi[\alpha(t)] - \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial M} \frac{\varphi[\alpha(\tau)] \alpha'(\tau) d\tau}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} + C = \\ &= \frac{1}{2} \varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial M} \varphi(\tau) \frac{\alpha'(\tau)}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} d\tau + C. \end{aligned}$$

Подставляя найденные предельные значения в краевое условие (1), получаем интегральное уравнение Фредгольма

$$\varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial M} \varphi(\tau) \left[\frac{\alpha'(\tau)}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} - \frac{1}{\tau - t} \right] d\tau = g(t), \quad t \in \partial M, \quad (6)$$

которое вместе с условием $\varphi(t) + \varphi[\alpha(t)] \equiv 0$ равносильно задаче (1).

Уравнение (6) имеет единственное решение при любой правой части. Оно может быть использовано для приближенного решения задачи (1).

3. Применим теперь задачу Карлемана (1) и равносильное ему интегральное уравнение (6) для решения модельной задачи. Пусть требуется построить функцию $F(z)$, реализующую конформное отображение области $\{|z| > 1, \text{Im } z > 0\}$ (рис. 1) на верхнюю полуплоскость. Отображающая функция F есть известная функция Жуковского $F(z) = \lambda(z + z^{-1})$, но мы здесь ее вычислим с целью иллюстрации метода.

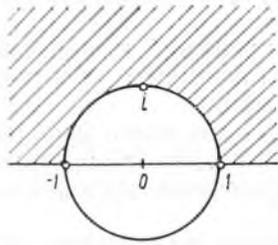


Рис. 1

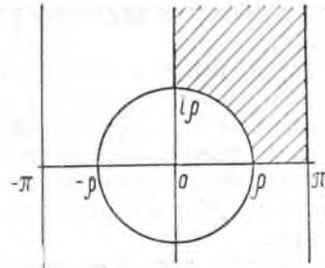


Рис. 2

В качестве M возьмем множество $\{|z| > 1\}$. Граница dM — окружность $|t| = 1$, ориентированная против часовой стрелки.

Введем функцию сдвига $\alpha(t) = \bar{t}$. Отображающая функция удовлетворяет следующему краевому условию:

$$F(\bar{t}) = F(t), \quad |t| = 1. \quad (7)$$

Это следует из принципа симметрии. Если считать, что $F(\infty) = \infty$, $F(i) = 0$, $F(z) \sim z$ при $z \rightarrow \infty$, то отображающая функция этими условиями определена однозначно. Полагая $F(z) = \Phi(z) + \frac{1}{z}$, из (7) получим задачу Карлемана для функции Φ :

$$\Phi(\bar{t}) - \Phi(t) = t - \bar{t}, \quad |t| = 1. \quad (8)$$

Преобразуем ядро интегрального уравнения (6), полагая $\alpha(t) = \bar{t} = \frac{1}{t}$; $\alpha'(t) = -\frac{1}{t^2}$:

$$\frac{\alpha'(\tau)}{\alpha(\tau) - \alpha(t)} = \frac{1}{\tau - t} = -\frac{1}{\tau^2 \left(\frac{1}{\tau} - \frac{1}{t} \right)} = \frac{1}{\tau - t} = -\frac{1}{\tau}.$$

Таким образом, интегральное уравнение (6) в нашем случае приводится к виду:

$$\varphi(t) - \frac{1}{2\pi i} \oint_{|t|=1} \frac{\varphi(\tau)}{\tau} d\tau = t - \frac{1}{t}, \quad |t| = 1.$$

Обозначая $\frac{1}{2\pi i} \oint_{|t|=1} \frac{\varphi(\tau)}{\tau} d\tau = \mu$, имеем:

$$\varphi(t) = \mu + t - \frac{1}{t}, \quad \mu = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|t|=1} \frac{\varphi(t)}{t} dt = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|t|=1} \left(\mu + t - \frac{1}{t} \right) \frac{dt}{t} = \mu.$$

Из условия $\varphi(\bar{t}) + \varphi(t) \equiv 0$ находим $\mu = 0$. Таким образом,

$$F(z) = z + \frac{1}{2\pi i} \oint_{|t|=1} \left(\tau - \frac{1}{\tau} \right) \frac{d\tau}{\tau - z} + C = z + \frac{1}{z} + C.$$

Из условия $F(i) = 0$ находим $C = 0$. Таким образом, $F(z) = z + z^{-1}$ — функция Жуковского (с точностью до множителя).

4. Пусть $0 < \rho < \pi$ и требуется построить функцию $F(z)$, реализующую конформное отображение кругового четырехугольника $\{0 < \operatorname{Re} z < \pi, \operatorname{Im} z > 0, |z| > \rho\}$ (рис. 2) на верхнюю полуплоскость, причем $F(\infty) = \infty$, $F(i\rho) = 0$. При такой нормировке отображающая функция существует и определяется с точностью до положительного множителя. Продолжая ее по принципу симметрии через прямолинейные участки границы данной области, получим 2π -периодическую функцию $F(z)$, фундаментальной областью которой является полоса $|\operatorname{Re} z| < \pi$, из которой выброшен круг $|z| < \rho$, причем на окружности должно выполняться условие: $F(\bar{t}) = F(t)$.

Полагая $\alpha(t) = \bar{t}$, будем искать решение задачи в виде $F(z) = \Phi(z) - \cos z$, и тогда для нахождения 2π -периодической функции $\Phi(z)$ получим краевую задачу Карлемана

$$\Phi[\alpha(t)] - \Phi(t) = \cos \alpha(t) - \cos t, \quad |t| = \rho. \quad (9)$$

Решение этой задачи ищем в виде:

$$\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{\Phi(\tau)}{2} \operatorname{ctg} \frac{\tau-z}{2} d\tau + C(\rho), \quad (10)$$

где $\varphi(\tau) + \varphi[\alpha(\tau)] \equiv 0$. Задача (9) равносильна интегральному уравнению

$$\varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{\Phi(\tau)}{2} \left[\alpha'(\tau) \operatorname{ctg} \frac{\alpha(\tau) - \alpha(t)}{2} - \operatorname{ctg} \frac{\tau-t}{2} \right] d\tau = \cos \alpha(t) - \cos t, \quad (11)$$

с дополнительным условием $\varphi(t) + \varphi[\alpha(t)] \equiv 0$.

Подставляя в уравнение (11) $\alpha(t) = \bar{t} = \frac{\rho^2}{t}$, $\alpha'(t) = -\frac{\rho^2}{t^2}$, получим

$$\begin{aligned} \varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \varphi(\tau) \left[-\frac{\rho^2}{2\tau^2} \operatorname{ctg} \frac{\rho^2}{2t\tau} (\tau-t) - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{\tau-t}{2} \right] d\tau = \\ = \cos \frac{\rho^2}{t} - \cos t, \end{aligned} \quad (12)$$

и так как $\varphi(\bar{t}) + \varphi(t) = 0$, то $\oint_{|\tau|=\rho} \frac{\varphi(t)}{t} dt = 0$.

Для решения уравнения (12) разложим его ядро в ряд. Исходим из разложения:

$$\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{z}{2} = \frac{1}{z} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} z^{2k-1}, \quad |z| < 2\pi, \quad (13)$$

где B_{2k} — числа Бернулли. Используя это разложение, имеем:

$$\begin{aligned} & \frac{\rho^2}{2\tau^2} \operatorname{ctg} \frac{\rho^2}{2t\tau} (\tau-t) - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{\tau-t}{2} = \\ & = \frac{\rho^2}{\tau^2} \left[\frac{\tau t}{\rho^2(\tau-t)} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \left(\frac{\rho^2(\tau-t)}{\tau t} \right)^{2k-1} \right] - \frac{1}{\tau-t} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} (\tau-t)^{2k-1} = \\ & = \frac{1}{\tau-t} \left(\frac{t}{\tau} - 1 \right) - \frac{\rho^2}{\tau^2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \frac{\rho^{2(2k-1)}}{\tau^{2k-1} t^{2k-1}} (\tau-t)^{2k-1} + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} (\tau-t)^{2k-1} = -\frac{1}{\tau} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \left(1 - \frac{\rho^{4k}}{\tau^{2k+1} t^{2k-1}} \right) (\tau-t)^{2k-1}. \end{aligned}$$

Учитывая, что $\oint_{|\tau|=\rho} \frac{\varphi(\tau)}{\tau} d\tau = 0$, перепишем уравнение (12) в следующем равносильном виде:

$$\begin{aligned} \varphi(t) + \frac{1}{2\pi i} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \oint_{|\tau|=\rho} \left(1 - \frac{\rho^{4k}}{\tau^{2k+1} t^{2k-1}} \right) (\tau-t)^{2k-1} \varphi(\tau) d\tau = \\ = \cos \frac{\rho^2}{t} - \cos t, \quad |t| = \rho. \end{aligned} \quad (14)$$

В силу того, что отображающая функция $F(z)$ должна быть четной, легко сделать заключение о четности неизвестной функции $\varphi(t)$. Разлагая ее в ряд Лорана и замечая, что $\varphi(t) = -\varphi(\bar{t}) = \varphi(-t)$, получаем

$$\varphi(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j \left(\frac{t^{2j}}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{2j}}{t^{2j}} \right), \quad |t| = \rho. \quad (15)$$

Коэффициенты этого разложения должны стремиться к нулю при $j \rightarrow \infty$. Далее

$$\cos \frac{\rho^2}{t} - \cos t = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \rho^{2m}}{(2m)!} \left(\frac{t^{2m}}{\rho^{2m}} - \frac{\rho^{2m}}{t^{2m}} \right). \quad (16)$$

Таким образом, уравнение (14) переписывается в виде:

$$\varphi(t) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \left(1 - \frac{\rho^{4k}}{\tau^{2k+1} t^{2k-1}} \right) (\tau-t)^{2k-1} \left(\frac{\tau^{2j}}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{2j}}{\tau^{2j}} \right) d\tau =$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \rho^{2m}}{(2m)!} \left(\frac{t^{2m}}{\rho^{2m}} - \frac{\rho^{2m}}{t^{2m}} \right). \quad (17)$$

Интегралы

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \left(1 - \frac{\rho^{4k}}{\tau^{2k+1} t^{2k-1}} \right) (\tau - t)^{2k-1} \left(\frac{\tau^{2j}}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{2j}}{\tau^{2j}} \right) d\tau \quad (18)$$

вычислим с помощью вычетов, учитывая, что подынтегральная функция от τ имеет внутри круга $|\tau| < \rho$ полюс только при $\tau=0$. Преобразуем подынтегральную функцию интеграла (18) к виду:

$$\frac{\tau^{2j} (\tau - t)^{2k-1}}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{4k-2j} (\tau - t)^{2k-1}}{\tau^{2(k-j)+1} t^{2k-1}} - \frac{\rho^{2j} (\tau - t)^{2k-1}}{\tau^{2j}} + \frac{\rho^{4k+2j} (\tau - t)^{2k-1}}{\tau^{2(k+j)+1} t^{2k-1}}.$$

Первое и последнее слагаемое имеют при $\tau=0$ нулевые вычеты, поэтому интеграл (18) приводится к виду:

$$- \frac{\rho^{4k-2j}}{t^{2k-1}} \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{(\tau - t)^{2k-1}}{\tau^{2k-2j+1}} d\tau - \frac{\rho^{2j}}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{(\tau - t)^{2k-1}}{\tau^{2j}} d\tau. \quad (19)$$

Первый из этих интегралов отличен от нуля только при $1 \leq 2k-2j+1 \leq 2k-1$, а второй — только при $2 \leq 2j \leq 2k$. Оба неравенства дают $1 \leq j \leq k$. При этом ограничении выражение (19) равно

$$\begin{aligned} & - \frac{\rho^{4k-2j}}{t^{2k-1}} C_{2k-1}^{2k-2j} (-t)^{2j-1} - \rho^{2j} C_{2k-1}^{2j-1} (-t)^{2k-2j} = \\ & = C_{2k-1}^{2k-2j} \left(\frac{\rho^{4k-2j}}{t^{4k-2j}} - \rho^{2j} t^{2k-2j} \right) = - \rho^{2k} C_{2k-1}^{2(k-j)} \left(\frac{t^{2(k-j)}}{\rho^{2(k-j)}} - \frac{\rho^{2(k-1)}}{t^{2(k-1)}} \right). \end{aligned}$$

Подставляя найденное выражение в (17), получаем:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \varphi_m \left(\frac{t^{2m}}{\rho^{2m}} - \frac{\rho^{2m}}{t^{2m}} \right) &= \sum_{k=2}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \rho^{2k} \sum_{j=1}^{k-1} C_{2k-1}^{2j} \left(\frac{t^{2j}}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{2j}}{t^{2j}} \right) + \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^{m-1} \rho^{2m}}{(2m)!} \left(\frac{t^{2m}}{\rho^{2m}} - \frac{\rho^{2m}}{t^{2m}} \right). \quad (20) \end{aligned}$$

Приравняв коэффициенты при одинаковых функциях $\left(\frac{t^{2m}}{\rho^{2m}} - \frac{\rho^{2m}}{t^{2m}} \right)$, получим бесконечную систему линейных алгебраических уравнений:

$$\varphi_m = \sum_{k=m+1}^{\infty} C_{2k-1}^{2m} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \rho^{2k} \varphi_{k-m} + (-1)^{m-1} \frac{\rho^{2m}}{(2m)!}, \quad (21)$$

$(0 < \rho < \pi; m = 1, 2, 3, \dots)$.

Перепишем эту систему в развернутом виде:

$$\left\{ \begin{aligned} \varphi_1 &= \left(\frac{|B_4|}{4!} C_3^2 \rho^4 \varphi_1 + \frac{|B_6|}{6!} C_5^2 \rho^6 \varphi_2 + \frac{|B_8|}{8!} C_7^2 \rho^8 \varphi_3 + \dots \right) + \frac{\rho^2}{2!}, \\ \varphi_2 &= \left(\frac{|B_6|}{6!} C_5^4 \rho^6 \varphi_1 + \frac{|B_8|}{8!} C_7^4 \rho^8 \varphi_2 + \frac{|B_{10}|}{10!} C_9^4 \rho^{10} \varphi_3 + \dots \right) - \frac{\rho^4}{4!}, \\ \varphi_3 &= \left(\frac{|B_8|}{8!} C_7^6 \rho^8 \varphi_1 + \frac{|B_{10}|}{10!} C_9^6 \rho^{10} \varphi_2 + \frac{|B_{12}|}{12!} C_{11}^6 \rho^{12} \varphi_3 + \dots \right) \frac{\rho^6}{6!}, \\ &\dots \dots \dots \end{aligned} \right. \quad (22)$$

Мы покажем, что эта система вполне регулярна [4] и, следовательно, имеет единственное решение (φ_m) , стремящееся к нулю, которое можно вычислить как методом итераций, так и методом редукции.

Полная регулярность системы означает, что существует $\theta(\rho) \in]0, 1[$ такое, что сумма модулей коэффициентов каждой строки матрицы системы (22) не превосходит $1 - \theta(\rho)$, т. е.

$$\sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} C_{2k-1}^{2m} \rho^{2k} \leq 1 - \theta(\rho), \quad (0 < \rho < \pi; m = 1, 2, \dots). \quad (23)$$

Для доказательства этого неравенства используем разложение (13) и вводим функцию

$$f(\rho) = \frac{1}{\rho} - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{\rho}{2} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} \rho^{2k-1}, \quad (24)$$

где степенной ряд имеет радиус сходимости 2π . Так как все коэффициенты разложения (24) положительны, то при $0 < \rho < 2\pi$ все производные функции f также положительны. Исходя из (24), вычислим и оценим левую часть неравенства (23):

$$\begin{aligned} 0 < \sum_{k=m+1}^{\infty} \frac{|B_{2k}|}{(2k)!} C_{2k-1} \rho^{2k} &= \frac{f^{(2m)}(\rho)}{(2m)!} \rho^{2m+1} = \\ &= 1 - \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^{2m}}{(2m)!} \operatorname{ctg}^{(2m)} \frac{\rho}{2} \leq 1 - \theta(\rho), \end{aligned} \quad (25)$$

где обозначено

$$\theta(\rho) = \inf_m \left\{ \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^{2m}}{(2m)!} \operatorname{ctg}^{(2m)} \frac{\rho}{2} \right\}. \quad (26)$$

Осталось только показать, что $0 < \theta(\rho) < 1$ при $0 < \rho < \pi$. С этой целью рассмотрим степенной ряд

$$f(z) = \frac{1}{z} - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{z}{2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\rho)}{n!} (z - \rho)^n, \quad (27)$$

сходящийся при $|z - \rho| < 2\pi - \rho$. Так как $0 < \rho < \pi$, то ряд будет сходиться, в частности, при $z = 2\rho$ и, значит, его общий член должен стремиться к нулю. Поэтому, в частности, имеет место равенство:

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{f^{(2m)}(\rho)}{(2m)!} \rho^{2m+1} = 0. \quad (28)$$

Отсюда и из (25) заключаем, что

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^{2m}}{(2m)!} \cdot \operatorname{ctg}^{(2m)} \frac{\rho}{2} = 1. \quad (29)$$

Функция $y(\rho) = \operatorname{ctg} \frac{\rho}{2}$ положительна и убывает при $0 < \rho < \pi$. Дифференцируя ее многократно, имеем:

$$\begin{aligned} y' &= -\frac{1}{2 \sin^2 \frac{\rho}{2}} = -\frac{1+y^2}{2} < 0; \\ y'' &= -yy' = \frac{y+y^3}{2} > 0; \dots \end{aligned}$$

Продолжая этот процесс, заключаем, что все производные четных порядков строго положительны, а все производные нечетных порядков строго отрицательны при $0 < \rho < \pi$. Этот вывод и равенство (29) показывают, что функция $\theta(\rho)$, определенная равенством (26), удовлетворяет неравенству $\theta(\rho) > 0$. Далее, $y''(\rho) = \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \frac{\rho}{2} \left(1 + \operatorname{ctg}^2 \frac{\rho}{2} \right)$ строго убывает при $0 < \rho < \pi$, и $y''(\pi) = 0$. Далее,

$$\lim_{\rho \rightarrow +0} \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^2}{2} \operatorname{ctg}'' \frac{\rho}{2} = \lim_{\rho \rightarrow +0} \frac{\rho^3}{4} \frac{\operatorname{ctg} \frac{\rho}{2}}{2 \sin^2 \frac{\rho}{2}} = 1,$$

поэтому

$$\theta(\rho) = \inf_m \left\{ \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^{2m}}{(2m)!} \cdot \operatorname{ctg}^{(2m)} \frac{\rho}{2} \right\} \leq \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\rho^2}{2} \cdot \operatorname{ctg}'' \frac{\rho}{2} < 1 \quad \text{при } 0 < \rho < \pi.$$

Таким образом, неравенства $0 < \theta(\rho) < 1$ установлены и тем самым полная регулярность системы (22) доказана.

Подставляя найденное выражение для $\varphi(\tau)$ в равенство (10), находим искомую отображающую функцию ($|z| < \rho$, $|\operatorname{Re} z| < \pi$):

$$\begin{aligned}
F(z) &= C(\rho) - \cos z + \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{\varphi(\tau)}{2} \operatorname{ctg} \frac{\tau-z}{2} d\tau = \\
&= C(\rho) - \cos z + \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \varphi_j \left(\frac{\tau^j}{\rho^{2j}} - \frac{\rho^{2j}}{\tau^j} \right) \operatorname{ctg} \frac{\tau-z}{2} d\tau = \\
&= C(\rho) - \cos z - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \rho^{2j} \varphi_j \frac{1}{2\pi i} \oint_{|\tau|=\rho} \frac{1}{\tau^j} \operatorname{ctg} \frac{\tau-z}{2} d\tau = \\
&= C(\rho) - \cos z - \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\rho^{2j} \varphi_j}{2^{2j-1} (2j-1)!} \operatorname{ctg}^{(2j-1)} \left(-\frac{z}{2} \right) = \\
&= C(\rho) - \cos z - \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j}{(2j-1)!} \left(\frac{\varphi}{2} \right)^{2j} \operatorname{ctg}^{(2j-1)} \left(\frac{z}{2} \right).
\end{aligned}$$

Постоянная $C(\rho)$ находится из условия нормировки

$$C(\rho) = \cos(i\rho) + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\varphi_j}{(2j-1)!} \left(\frac{\rho}{2} \right)^{2j} \operatorname{ctg}^{(2j-1)} \left(\frac{i\rho}{2} \right).$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Зверович Э. И.—Сибир. матем. ж., 1973, т. 14, № 1, с. 64.
2. Коппенфельс В., Штальман Ф. Практика конформных отображений.— М., 1963.
3. Квеселава Д. А.—Труды Тбил. матем. ин-та АН ГрузССР, 1948, т. 16, с. 39.
4. Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближенные методы высшего анализа.— М.—Л., 1962.

Кафедра теории функций

УДК 517.966

Р. ГАБАСОВ

ВОПРОСЫ КОНСТРУКТИВНОЙ ТЕОРИИ ОПТИМАЛЬНОГО УПРАВЛЕНИЯ

1. Двадцать пять лет тому назад с принципа максимума Л. С. Понтрягина [1] — фундаментального результата прикладной математики началась математическая теория оптимальных процессов. Задачи оптимального управления возникли в современной технике, экономике, военном деле и других сферах человеческой деятельности, где успех, существенное развитие связаны с исключительными затратами, с использованием предельных возможностей. Практическая значимость результатов была и остается главной причиной большого интереса к новому разделу математики и бурного развития теории оптимального управления в течение последней четверти века. Принцип максимума наряду с динамическим программированием Р. Беллмана [2] резко увеличил интенсивность исследований по экстремальным задачам.

Успехи теории оптимального управления обыкновенными динамическими системами стимулировали исследования по оптимизации систем с последствием [3], стохастических систем [4] и систем с распределенными параметрами [5]. В последнее десятилетие много внимания уделялось теории дифференциальных игр [6, 7], которая явилась развитием теории оптимального управления одним участником на случай, когда в процессе управления принимают участие игроки с несовпадающими интересами.

Достигнутый к настоящему времени уровень теоретических разработок позволяет для любой прикладной задачи сформулировать полный набор необходимых условий оптимальности [8].

Необходимые условия оптимальности позволяют в ряде случаев получить такие качественные характеристики решения, которые в совокупности с известными свойствами конкретных систем достаточны для по-

строения полного решения. В приложениях широко используется и второй путь, когда, исходя из необходимых условий оптимальности, строятся алгоритмы вычисления оптимальных управлений. Для относительно простых задач с хорошо изученной динамикой объектов оптимизации указанные и другие аналогические им способы являются эффективными. Однако давно было замечено, что по мере усложнения задач достижимая степень качественного исследования уже не достаточно для построения эффективных алгоритмов. Впервые это обстоятельство четко проявилось в задачах оптимального управления с фазовыми ограничениями. Затем с подобными трудностями столкнулись в стохастическом и адаптивном управлении, в управлении системами с распределенными параметрами. Особенно сильно разрыв между качественными результатами и возможностью их конструктивных приложений ощущается в теории дифференциальных игр.

2. Следует отметить, что в теории оптимизации еще за десять лет до появления принципа максимума был создан и уже в течение тридцати пяти лет развивается раздел, полностью основанный на конструктивном подходе. Речь идет о линейном программировании (ЛП). Элементы ЛП появились в тридцатые годы в работах Л. В. Канторовича, но как мощное оружие прикладной математики ЛП оформилось в 40—50-е годы после создания Дж. Данцигом симплекс-метода [9]. С появлением теории оптимальных процессов как-то смялся интерес к ЛП. Казалось, что этот элементарный раздел теории оптимизации достиг своего предела развития. Из ЛП выросли сначала выпуклое программирование, затем нелинейное программирование (НП) многочисленными разделами, носящие в своих названиях слово «программирование», которое в комбинации с другими словами отражает специфику раздела. Удивительным было то, что в течение длительного времени две ветви теории оптимизации (НП и теория оптимального управления) развивались совершенно независимо, различными путями, выделяя разные стороны проблемы оптимизации. В НП основные усилия направлялись на создание эффективных алгоритмов, в оптимальном управлении — на совершенствование аналитических методов и результатов. Однако в последние годы как в оптимальном управлении, так и в НП явно усилились тенденции к взаимному сближению. В оптимальном управлении это проявилось в повышении интереса к применению вычислительных методов НП для расчета оптимальных управлений, в НП — в переходе к исследованию больших задач, среди которых особое внимание стали привлекать динамические задачи. Можно надеяться, что обе тенденции в недалеком будущем приведут к созданию единой теории оптимизации, состоящей из тонких качественных и эффективных конструктивных методов.

Каждый, кто собирается заняться конструктивными методами оптимального управления нелинейными системами, довольно быстро путем несложных рассуждений приходит к мысли о необходимости изучения и анализа методов решения задач ЛП. Действительно, любой эффективный алгоритм построения оптимального управления в нелинейной задаче должен быть достаточно эффективным и в линейной задаче, ибо среди прикладных нелинейных задач очень много слабонелинейных, для которых эффект линейности еще очень заметен. По аналогичным причинам принципы, заложенные в алгоритмы оптимизации динамических систем, должны быть эффективными и для статических задач.

Рассмотрим общую линейную статическую задачу оптимизации

$$c'x \rightarrow \max, \quad b_* \leq Ax \leq b^*, \quad d_* \leq x \leq d^*, \quad (1)$$

где A — $m \times n$ -матрица. Различные частные случаи задачи (1) исследовались многими учеными. Современная теория линейного программирования имеет ряд законченных аналитических результатов и эффективных всесторонне испытанных численных алгоритмов. Среди последних особое место занимает симплекс-метод, основной вариант которого разработан для канонической задачи.

$$c'x \rightarrow \max, Ax = b, x \geq 0. \quad (2)$$

Именно он в различных версиях широко представлен в математическом обеспечении современных ЭВМ. Поэтому анализ классических конструктивных методов с целью их обобщения и использования в оптимальном управлении естественно начать с симплекс-метода.

Основные достоинства симплекс-метода: 1) он точный и прямой, т. е. в процессе его работы все ограничения задачи постоянно выполняются; 2) он релаксационный, т. е. в нем от итерации к итерации значение целевой функции увеличивается; 3) он конечен, т. е. решение задачи получается с помощью конечного числа итераций на ЭВМ. Перечисленные свойства позволяют в любой момент процесса решения задачи иметь план, который лучше начального. К недостаткам симплекс-метода можно отнести следующее: 1) он начинает работу только со специального (базисного) плана, начальная информация в практической задаче не обязательно имеет плоский вид; 2) на каждой итерации базисный план преобразуется в базисный, что представляет ограничение на принцип преобразования информации, не вызванное существом задачи; в алгоритме нет критерия останова после построения ϵ -оптимального плана.

В основу нового метода решения линейных задач [10], в котором почти полностью сохранены и в значительной мере преодолены отмеченные недостатки, положена задача (1). Выбор модели (1) вместо (2) позволяет более точно учесть особенности конкретных прикладных задач и согласовать их с априорной информацией о планах. В новом методе учтена возможность использования любой информации, отражающей опыт функционирования реальных систем, догадки и интуицию специалистов и т. п. Чем ценнее эта информация, тем меньше затрат на ее алгоритмическое преобразование с целью получения ϵ -оптимальных планов. Симплекс-алгоритм на геометрическом языке является реализацией принципа направленного перемещения по вершинам множества планов. Алгоритм нового метода основан на принципе уменьшения оценки субоптимальности. Этот принцип непосредственно связан с расширенной целью задачи (1), под которой понимается не вычисление оптимального плана x^0 , а построение для заданного $\epsilon \geq 0$ субоптимального плана $x^\epsilon (c'x^0 - c'x^\epsilon \leq \epsilon)$. При этом не накладывается других условий на способ преобразования информации.

Численные эксперименты на ЭВМ показали эффективность нового метода. Сейчас разработаны различные его модификации, обладающие рядом преимуществ перед основным вариантом.

Симплекс-метод — основной метод, но им не исчерпывается арсенал методов ЛП. Работа в этой области продолжается и по сей день. Исследования особенно интенсифицировались в связи с необходимостью решения больших задач специальной структуры, среди которых стали выделять динамические задачи. В ответ на это в теории оптимизации наряду с анализом ранее известных методов стали разрабатываться новые, среди которых в последние годы особое внимание уделялось приближенным методам и, в частности, методам с модифицированной функцией Лагранжа.

В линейном и нелинейном программировании наступает этап распространения и обобщения испытанных алгоритмов решения статических задач на динамические задачи. Таким образом осуществляется постепенная состыковка указанных методов с конструктивной теорией оптимального управления.

3. Под конструктивной теорией оптимального управления понимается та часть общей теории оптимальных процессов, в которой в основу изучения оптимальных управлений положены алгоритмы их численного построения. При этом те или иные аналитические характеристики оптимальных управлений, описание которых является основной целью качественной теории, получают попутно как свойства конкретного алгоритма. Элементы конструктивной теории возникли вместе с принципом максимума. В дальнейшем они дополнялись и развивались в разных направ-

лениях. Однако до сих пор нельзя с уверенностью сказать, что основы конструктивной теории оптимального управления созданы, что в ней уже открыт свой «принцип максимума». Бросается в глаза оснащенность ЛП добротными вычислительными алгоритмами, с одной стороны, и скудность оптимального управления в области эффективных (устойчивых и испытанных) алгоритмов — с другой.

В конструктивной теории оптимального управления целесообразно различать 1) алгоритмы оптимизации в специальных классах функций, выбранных из соображений удобства технической реализации или с целью понижения сложности экстремальной задачи, 2) алгоритмы оптимизации в общих классах функций, типичных для качественной теории оптимального управления. Алгоритмы первой группы очень близки к алгоритмам нелинейного программирования и являются модификациями последних, в которых учтены «динамические» особенности новых моделей. Они с позиций нового подхода, упомянутого в п. 2, разработаны в [10]. В данном пункте излагаются первые результаты по второй группе алгоритмов, полученные С. В. Гневко, Ф. М. Кирилловой и автором.

Рассмотрим линейную задачу оптимального управления

$$I(u) = c'x(t_1) \rightarrow \max, \quad \dot{x} = Ax + bu, \quad x(0) = x_0, \quad (3)$$

$$f_* \leq u(t) \leq f^*, \quad t \in T = [0, t_1], \quad Hx(t_1) = g,$$

где x — n -вектор состояния динамической системы; u — скаляр (управление).

Допустимыми управлением и траекторией будем называть кусочно-непрерывную функцию $u(t)$, $t \in T$, и соответствующее ей решение $x(t)$, $t \in T$, системы (3), вдоль которых выполняются все ограничения (3).

Решение $u^0(t)$, $t \in T$, задачи (3) называется оптимальным управлением: $I(u^0) = \max I(u)$. Оптимальному управлению соответствует оптимальная траектория $x^0(t)$, $t \in T$.

Допустимое управление $u^\varepsilon(t)$, $t \in T$, называется ε -оптимальным (субоптимальным), если $I(u^0) - I(u^\varepsilon) \leq \varepsilon$. В конструктивной теории является построение именно ε -оптимального, а не оптимального управления как в качественной теории основной целью. Заметим, что ε — оптимальные управления ($\varepsilon > 0$) в отличие от оптимальных существуют в каждой задаче и фактически удовлетворяют потребностям всех приложений.

Следуя одному из принципов конструктивной теории, будем считать, что наряду с моделью (3) известна некоторая априорная информация о решении задачи (3). Для определенности из всех типов априорной информации рассмотрим один, когда известно некоторое допустимое управление $u(t)$, $t \in T$. Цель алгоритма — преобразовать эту информацию и получить ε -оптимальное управление.

Далее описывается только прямой релаксационный алгоритм, в котором на всех итерациях допустимые управления прямой задачи (3) преобразуются опять в допустимые управления и значение критерия качества при этом не убывает.

Для соблюдения ограничений в алгоритме используется опора, под которой понимается каждая совокупность $T_{\text{оп}} = \{T_j, j = 1, m\}$ непересекающихся отрезков $T_j = [\tau_j, \tau_j] \subset T$, таких, что невырождены импульсная опорная $A_{\text{оп}} = \{a(\tau_j), j = 1, m\}$, $a(t) = H\Phi(t_1)\Phi^{-1}(t)b$, $\Phi = A\Phi$, $\Phi(0) = E$, $\tau_j = \tau_j \vee \tau_j = \tau_j$. и опорная $A(T_{\text{оп}}) = \left\{ \int_{T_j} a(t) dt, j = 1, m \right\}$

матрицы.

Выбор начальной опоры — специальный вопрос, который здесь не обсуждается.

Пару $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ из допустимого управления и опоры назовем опорным управлением.

Пусть $\{u(\cdot), T_{\text{оп}}\}$ — начальное опорное управление. Первая задача каждого алгоритма: проверить начальную информацию на субоптимальность. В предлагаемом алгоритме это осуществляется с помощью кри-

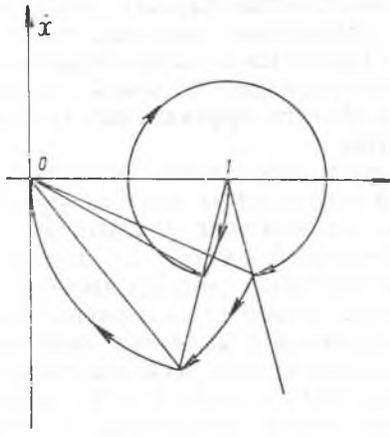


Рис. 1

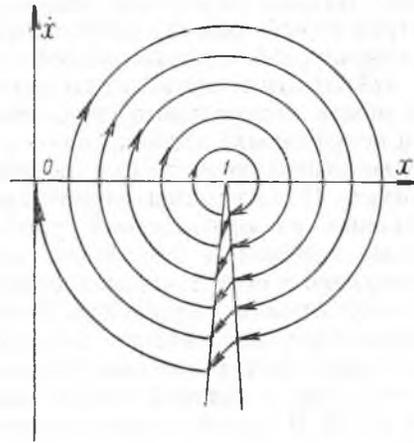


Рис. 2

терия субоптимальности: для ε -оптимальности допустимого управления $u(t)$, $t \in T$, необходимо и достаточно существование такой опоры $T_{оп}$ и кусочно-непрерывной функции $\varepsilon(t) \geq 0$, $t \in T$, что выполняется принцип ε -максимума

$$\mathcal{H}(x(t), \psi(t), u(t)) = \max_{f_* < u < f^*} \mathcal{H}(x(t), \psi(t), u) - \varepsilon(t), \quad t \in T, \quad \int_T \varepsilon(t) dt \leq \varepsilon. \quad (4)$$

Здесь $\mathcal{H}(x, \psi, u) = \psi'(Ax + bu)$; $x(t)$, $\psi(t)$, $t \in T$, траектории системы (3) и сопряженной системы $\dot{\psi} = -A'\psi$, $\psi(t_1) = c - H'v$, $v' = c_{оп}' A_{оп}^{-1}$, $c_{оп} = \{c(\tau_j), j = 1, m\}$. $c(t) = c' \Phi(t_1(\Phi^{-1}(t) \cdot b)$

Если на опорном управлении $\{u(\cdot), T_{оп}\}$ выполняются соотношения (4), то процесс решения задачи (3) прекращается на ε -оптимальном управлении $u(t)$, $t \in T$. В противном случае задача алгоритма состоит в построении нового опорного управления $\{\bar{u}(\cdot), T_{оп}\}$, $I(\bar{u}) \geq I(u)$.

За недостатком места здесь не приводится описание алгоритма. Его работа иллюстрируется на следующем примере:

$$\int_0^{t_1} u(t) dt \rightarrow \max, \quad \ddot{x} + x = u, \quad x(0) = 1, \quad \dot{x}(0) = 0, \quad 0 \leq u(t) \leq 1, \quad t \in [0, t_1],$$

$$x(t_1) = \dot{x}(t_1) = 0.$$

Эта задача тесно связана с задачей об успокоении маятника с минимальным расходом топлива:

$$\int_0^{t_1} u(t) dt \rightarrow \min, \quad \ddot{x} + x = u, \quad x(0) = 1, \quad \dot{x}(0) = 0, \quad 0 \leq u(t) \leq 1, \quad t \in [0, t_1],$$

$$x(t_1) = \dot{x}(t_1) = 0. \quad (5)$$

Пусть $t_1 = 2\pi$. В качестве начального приближения возьмем следующее допустимое управление: $u_0(t) = 0$, $t \in [0, \frac{\pi}{3}] \cup [\frac{2\pi}{3}, 2\pi]$, $u_0(t) = 1$, $t \in [\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}]$. Начальные опорные моменты $\tau_1^{(0)} = \frac{\pi}{3}$, $\tau_2^{(0)} = \frac{2\pi}{3}$, опорные отрезки $T_1^0 = [0, \frac{\pi}{3}]$, $T_2^0 = [\frac{2\pi}{3}, \pi]$. Первая итерация приводит к управлению $u_1(t) = 1$, $t \in [0, \frac{\pi}{3}] \cup [\frac{2\pi}{3}, \pi]$, $u_1(t) = \frac{2}{3}$, $t \in [\frac{\pi}{3}, \frac{2\pi}{3}]$, $u_1(t) = \frac{1}{3}$, $t \in [\pi, 2\pi]$. Новые опорные моменты: $\tau_1^{(1)} = \frac{4\pi}{4}$, $\tau_2^{(1)} = \frac{5\pi}{3}$, опорные отрезки: $T_1^{(1)} = [\pi, \frac{4\pi}{3}]$, $T_2^{(1)} = [\frac{5\pi}{3}, 2\pi]$. Следующая итерация

приводит к оптимальному управлению $u^0(t) = 1, t \in \left[0, \frac{4\pi}{3}\right) \cup \left[\frac{5\pi}{3}, 2\pi\right]$,
 $u^0(t) = 0, t \in \left[\frac{4\pi}{3}, \frac{5\pi}{3}\right)$.

Значительно сложнее оптимальное управление для $t_1 = 4\pi$:

$$u^0(t) = 1, t \in \left[0, \pi + \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}\right) \cup \left[2\pi - \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}, 3\pi + \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}\right) \cup \left[4\pi - \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}, 4\pi\right], u^0(t) = 0,$$

$$t \in \left[\pi + \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}, 2\pi - \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}\right) \cup \left[3\pi + \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}, 4\pi - \arcsin \frac{\sqrt{15}}{4}\right).$$

Оптимальная траектория на фазовой плоскости для этого случая изображена на рис. 1. Следует отметить, что общее время движения с $u = 0$ меньше, чем для случая $t_1 = 2\pi$.

При $t_1 \rightarrow \infty$ полное время движения с $u = 0$ уменьшается. Этот факт физически особенно интересен, если его перевести на язык задачи (5).

Качественный вид оптимальных траекторий при больших t_1 приведен на рис. 2. Результаты для больших значений получаются продолжением по параметру t_1 предыдущего решения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Понтрягин Л. С., Болтянский В. Г., Гамкрелидзе Р. В., Мищенко Е. Ф. Математическая теория оптимальных процессов.— М., 1961.
2. Беллман Р. Динамическое программирование.— М., 1960.
3. Габасов Р., Кириллова Ф. М. Принцип максимума в теории оптимального управления.— Минск, 1974.
4. Флеминг У., Ришел Р. Оптимальное управление детерминированными и стохастическими системами.— М., 1978.
5. Лионс Ж. Л. Оптимальное управление системами, описываемыми уравнениями с частными производными.— М., 1972.
6. Айзекс Р. Дифференциальные игры.— М., 1967.
7. Красовский Н. Н., Субботин А. И. Позиционные дифференциальные игры.— М., 1974.
8. Дубовицкий А. Я., Милютин А. А. Необходимые условия слабого экстремума в общей задаче оптимального управления.— М., 1971.
9. Данциг Дж. Линейное программирование, его приложения и обобщения.— М., 1966.
10. Габасов Р., Кириллова Ф. М. Методы линейного программирования: Ч. 1—3.— Минск, 1977, 1978, 1980.

Кафедра методов оптимального управления

УДК 519.62

В. В. БОБКОВ

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ С УЛУЧШЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ СОГЛАСОВАННОСТИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ И РАЗНОСТНОЙ ЗАДАЧ

При построении методов численного решения задачи Коши для системы уравнений вида

$$u_i' = f_i(t, u_1, u_2, \dots, u_m), \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (1)$$

обычно наряду с традиционными требованиями аппроксимации стараются удовлетворить также ряд дополнительных требований, порождаемых специфическими особенностями рассматриваемой системы. Например, в случае так называемых жестких систем [1], характеризующихся большим разбросом собственных значений матрицы Якоби, приходится

уделять особое внимание проблеме согласования по устойчивости дифференциальных и соответствующих разностных уравнений. Часто высокий уровень такой согласованности оказывается предпочтительнее высокого порядка аппроксимации, если, конечно, эти требования вступают в противоречие.

Для проверки свойств устойчивости системы разностных уравнений, порождаемой избранным численным методом, обычно прибегают к помощи модельной системы

$$u' = Au, \quad (2)$$

где $A = \{a_{ij}\}$ — квадратная матрица порядка m , собственные значения λ_k которой имеют отрицательные вещественные части. Следуя Дальквисту [2], численный метод при этом называют A -устойчивым, если применительно к (2) при любом постоянном шаге $\tau > 0$ он приводит к системе разностных уравнений, все решения которой, как и решения дифференциальной системы (2), при $t \rightarrow \infty$ асимптотически выходят на нулевое положение равновесия.

Одним из существенных недостатков известных (см., например, [1—3]) A -устойчивых методов являются трудности их численной реализации. Актуальна поэтому задача построения таких A -устойчивых методов, которые в ряде случаев могут допускать более простую реализацию, а также разработка новых способов численной реализации неявных A -устойчивых методов. При построении подобных вычислительных алгоритмов, предназначенных для более узких классов жестких систем, часто бывает целесообразным также ослабление или усиление требования A -устойчивости.

Некоторые новые результаты в этих направлениях поиска будут приведены и в данной работе.

Поскольку избранная модельная система (2) не отражает непосредственной зависимости от t правых частей уравнений (1), для простоты записей в дальнейшем мы будем и исходную систему дифференциальных уравнений считать автономной:

$$u' = f(u). \quad (3)$$

Запишем применительно к (3) как обобщение одношагового метода из [4] следующее семейство неявных методов, зависящих от параметра $\sigma > 0$:

$$\hat{y} = y + \tau R f(y), \quad (4)$$

где $y \approx u(t)$, $\hat{y} \approx u(t + \tau)$, $R = \text{diag}\{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m\}$,

$$\rho_i = \frac{\hat{f}_i(y)}{\hat{f}_i(y) + \sigma (f_i(y) - f_i(y + \tau f(y)))}.$$

Методы вида (4) можно рассматривать в качестве нелинейного аналога известных линейных методов с весами [5]

$$\hat{y} = y + \tau ((1 - \sigma) f(y) + \sigma f(\hat{y})). \quad (5)$$

В случае $\sigma = 0$ методы (4) и (5) вырождаются в явный метод Эйлера. При $\sigma = 1/2$ оба метода имеют второй порядок точности и характеризуются сходными свойствами согласованности дифференциальной и разностной задач (см., например, $m = 1$ [4]). Наибольший интерес здесь представляет случай $\sigma = 1$. Из семейства (5) в этом случае выделяется неявный метод Эйлера

$$\hat{y} = y + \tau f(\hat{y}), \quad (6)$$

который обладает свойством A -устойчивости. Легко видеть, что решение \hat{y} системы (6) удовлетворяет также и системе уравнений (4) с $\sigma = 1$. При этом, однако, численная реализация метода (4) с $\sigma = 1$ способом простых итераций имеет определенные преимущества перед подобной реализацией метода (6).

Будем считать, например, матрицу A системы (2) отрицательно опре-

деленной, а ее собственные значения λ_k различными. Тогда любое решение этой системы можно [6] представить в виде

$$u(t) = \sum_{k=1}^m c_k \xi^k \exp(\lambda_k t), \quad (7)$$

где ξ^k , $k=1, 2, \dots, m$, — ортонормированные собственные векторы матрицы A , а c_k , $k=1, 2, \dots, m$, — произвольные постоянные.

Вектор

$$v^k(t) = \xi^k \exp(\lambda_k t) \quad (8)$$

является, очевидно, решением системы (2), удовлетворяющим начальному условию $u(0) = \xi^k$. Такое решение часто называют k -й гармоникой системы (2).

В силу (7) любое решение системы (2) есть линейная комбинация ее гармоник. Поэтому важной характеристикой метода является его способность сохранять основные свойства гармоник.

Оказывается, что явный метод, получающийся из (4) с $\sigma=1$ при конечном числе простых итераций с $y^0=y$, устойчив на каждой гармонике вида (8) системы (2) для любого $\tau > 0$ (обладает свойством спектральной устойчивости). Например, в случае одной итерации имеем

$$\hat{y}_i = y_i + \tau \sum_{j=1}^m a_{ij}^1 y_j \frac{\sum_{j=1}^m a_{ij}^1 y_j}{2 \sum_{j=1}^m a_{ij}^1 y_j - \sum_{j=1}^m a_{ij}^1 \left(y_j + \tau \sum_{s=1}^m a_{js}^1 y_s \right)}$$

Если положить $y = \xi^k$ и учесть, что $A \xi^k = \lambda_k \xi^k$, то последнее равенство можно привести к виду

$$\hat{y}_i = \xi_i^k + \tau \lambda_k \xi_i^k \frac{\lambda_k \xi_i^k}{2 \lambda_k \xi_i^k - \sum_{j=1}^m a_{ij}^1 (\xi_j^k + \tau \lambda_k \xi_j^k)} = \xi_i^k \frac{1}{1 - \lambda_k \tau}$$

где, как и выше, нижним индексом обозначен номер координаты соответствующего вектора.

Отсюда следует, что рассматриваемый метод для любого $\tau > 0$ выводит, при этом монотонно, каждую из гармоник (8) на нулевое положение равновесия.

Реализация же метода (6) способом простых итераций таким свойством не обладает.

Можно предложить методы, которые еще лучше обрабатывают гармоник вида (8). Один из способов получения таких вычислительных правил основан на регуляризации многомодульных методов, построенных по принципу последовательного повышения порядка точности [7]. В качестве простейшего примера приведем здесь следующий метод второго порядка точности:

$$y^* = y + \frac{1}{2} \tau R^* f(y), \quad \hat{y} = y + \tau R f(y^*), \quad (9)$$

где $R^* = \text{diag} \{ \rho_1^*, \rho_2^*, \dots, \rho_m^* \}$, $R = \text{diag} \{ \rho_1, \rho_1, \dots, \rho_m \}$,

$$\rho_i^* = \frac{1}{1 - \frac{1}{2} z_i}, \quad \rho_i = \frac{\left(1 - \frac{1}{2} z_i \right)^2}{1 - z_i + \frac{1}{2} z_i^2},$$

$$z_i = \frac{f_i(y + \tau f(y)) - f_i(y)}{f_i(y)}$$

Если в случае метода (4) с $\sigma=1$ при нахождении гармоник (8) множитель $\exp(\lambda_k \tau)$ аппроксимировался отношением $\frac{1}{1 - \lambda_k \tau}$ с погрешностью порядка τ^2 , то в методе (9) такое приближение осуществляется посред-

ством выражения $\frac{1}{1 - \lambda_k \tau + \frac{1}{2} \lambda_k^2 \tau^2}$ с ошибкой порядка τ^3 .

Аналогично строятся и методы более высоких порядков точности с подобной же устойчивой аппроксимацией экспоненты.

В развитие последнего требования можно построить примеры явных методов, которые вообще точно на гармониках (8). Простейший из таких методов имеет вид

$$\dot{y} = y + \tau R f(y), \quad (10)$$

где $R = \text{diag} \{ \rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m \}$, $\rho_i = \frac{\exp z_i - 1}{z_i}$, при этом z_i может быть вычислено, например, как и в случае метода (9).

Если в (9) для нахождения ρ_i^* и ρ_i использовать выражения

$$\rho_i^* = 2 \frac{\exp\left(\frac{1}{2} z_i\right) - 1}{z_i}, \quad \rho_i = \frac{\exp z_i - 1}{z_i \exp\left(\frac{1}{2} z_i\right)}, \quad (11)$$

то получим новый пример метода, точного на гармонике вида (8) и обладающего вторым порядком точности на произвольном решении исходной системы.

Нетрудно построить подобные методы и более высоких порядков точности.

Сходную регуляризацию можно провести и в случае неявных методов разных порядков точности. Простейший пример подобного метода имеет вид

$$\dot{y} = y + \tau R f(\hat{y}), \quad (12)$$

где

$$R = \text{diag} \{ \rho_1, \rho_2, \dots, \rho_m \}, \quad \rho_i = \frac{\exp z_i - 1}{z_i \exp z_i} = \frac{1 - \exp(-z_i)}{z_i},$$

при этом в дополнение к указанному ранее способу вычисления z_i здесь можно предложить, например, и следующие нелинейные выражения для z_i через искомые величины \hat{y}_j ($j = 1, 2, \dots, m$):

$$z_i = \frac{\hat{f}_i(y + \tau f(\hat{y})) - f_i(y)}{\hat{f}_i(\hat{y})}, \quad z_i = \tau \frac{\hat{f}_i(\hat{y}) - f_i(y)}{\hat{y}_i - y_i}.$$

Как и методы (10) и (9), (11), метод (12) при любом $\tau > 0$ точно решает модельное уравнение (2) в случае $m=1$. Кроме того, он устойчив на произвольном решении модельной системы (2) при $m > 1$.

Действительно, так как в случае этого метода $\rho_i > 0$ как для $z_i < 0$, так и для $z_i > 0$, матрица R , как и матрица $-A$, положительно определена. Поэтому собственные значения матрицы $-RA$ положительны, и, следовательно, спектр матрицы $S = (E - \tau RA)^{-1}$ при любом $\tau > 0$ принадлежит открытому отрезку $(0, 1)$. Так как справедливо (см. (12)) соотношение $\dot{y} = Sy$, то тем самым при любом $\tau > 0$ будет обеспечен выход приближенного решения, полученного по методу (12), на нулевое положение равновесия системы (2).

Метод (12), как и любой другой неявный метод, должен быть дополнен способом его численной реализации, который, по возможности, не нарушал бы достигнутых свойств устойчивости. В качестве подобного способа можно предложить, например, квазиньютоновский метод решения систем нелинейных уравнений, основанный на псевдообращении матриц (см. [8]). Этот способ характерен тем, что не требует (как метод Ньютона, например) на каждом шаге итераций формирования и непосредственного обращения якобиана, при этом произвольной линейной системе m алгебраических уравнений он доставляет точное решение не более чем за $m+1$ итераций, сохраняя, таким образом, при числе ите-

раций $N=m+1$ свойство A -устойчивости избранного неявного метода, приводящего в случае (2) к линейной системе уравнений относительно неизвестного вектора \bar{y} . При $N < m+1$ такой способ (подобно рассмотренному способу численной реализации неявного метода (4) с $\sigma=1$) сохраняет свойство спектральной устойчивости исходного неявного метода.

В заключение отметим, что предлагаемые здесь методы могут быть использованы также при построении разностных схем с расширенной областью устойчивости в случае граничных задач для дифференциальных уравнений с частными производными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Черноруцкий И. Г. Численные методы решения жестких систем.— М., 1979.
2. Dahlquist G.— ВЖТ, 1963, в. 3, р. 27.
3. Артемьев С. С., Демидов Г. В.— В кн.: Некоторые проблемы вычислительной и прикладной математики.— Новосибирск, 1975, с. 214.
4. Бобков В. В.— Докл. АН БССР, 1979, т. 23, № 5, с. 406.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем.— М., 1977.
6. Беллман Р. Введение в теорию матриц.— М., 1969.
7. Бобков В. В.— Изв. АН БССР. Сер. физ.-матем. наук, 1967, № 4, с. 27.
8. Бобков В. В., Городецкий Л. М.— Изв. АН БССР. Сер. физ.-матем. наук, 1980, № 4, с. 14.

Кафедра вычислительной математики

УДК 512

А. А. БОНДАРЕНКО

АЛГЕБРА И АЛГЕБРАИЧЕСКАЯ ГЕОМЕТРИЯ В РАБОТАХ МАТЕМАТИКОВ БГУ ИМЕНИ В. И. ЛЕНИНА

Алгебра и алгебраическая геометрия относятся к наиболее интенсивно развивающимся разделам математики. Для современной математики характерен процесс непрерывного обновления благодаря постоянному притоку новых глубоких идей обобщающего характера. В этом процессе одна из главных ролей принадлежит алгебре. За последние 15—20 лет сформировалась и завоевала признание белорусская алгебраическая школа, имеющая к настоящему времени ряд значительных достижений, которые получили большой резонанс как в нашей стране, так и за рубежом.

Акад. АН СССР Н. Н. Боголюбов в статье «О достижениях советской математики» охарактеризовал в обобщенной форме основные результаты математических исследований, проведенных в Белоруссии: «За последние годы удалось не только преодолеть отставание в алгебраической K -теории, имеющей многочисленные применения в топологии и алгебраической геометрии, но и получить наиболее существенные в мире результаты в этой области.

Важный прогресс достигнут в теории линейных групп, где разработан общий метод исследования, основанный на применении алгебро-геометрических и теоретико-числовых идей, позволивший решить ряд известных задач (ИМ АН БССР)*. Дальнейшее развитие этого метода как в нашей стране, так и за рубежом сделало его основным методом теории линейных групп.

В теории классических групп существовала гипотеза о тривиальности спинорной нормы унитарной группы над некоммутативным телом. В 1974 г. с помощью метода локально компактных локализаций было показано, что спинорная норма не может быть тривиальной (ИМ АН БССР)» [1].

Н. Н. Боголюбов отмечает, что в области алгебраической геометрии

* Институт математики АН БССР.

получили большое развитие арифметическая, структурная и аналитическая теории групповых алгебраических многообразий, т. е. алгебраических групп. Эти проблемы имеют многочисленные связи с теорией чисел, топологией, функциональным анализом, теорией автоморфных функций. Удалось не только преодолеть отставание в исследовании алгебраических групп в нашей стране, но и занять передовые позиции на мировом уровне.

«...В арифметической теории алгебраических групп получено решение проблемы аппроксимации (ИМ АН БССР, 1969—1970). Это повлекло за собой решение ряда других вопросов, в частности, было дано полное решение проблемы классификации максимальных арифметических подгрупп (ИМ АН БССР).

Выделены новые классы систем дифференциальных уравнений, допускающие подвижные особые точки, отличные от алгебраических. Получены новые результаты, относящиеся к аналитической структуре решений систем Ляпунова в случае нулевых и чисто мнимых характеристических чисел (ИМ АН БССР)» [1].

В Белоруссии первая работа по алгебре, относящаяся к теории линейных групп, выполнена в 1940 г. В. Л. Нисевичем [2], который был первым заведующим кафедрой высшей алгебры Белгосунiversитета, организованной в 1938 г. Эта работа посвящена представлению свободных произведений групп матрицами. Она не утратила своего значения и поныне.

Систематические исследования по алгебре в Белгосунiversитете были начаты Д. А. Супруненко, который в 1945 г. возглавил кафедру высшей алгебры.

Начало исследований по алгебраической геометрии (теории алгебраических групп) и топологической алгебре связано с именем акад. АН БССР В. П. Платонова (60-е годы). Это существенно расширило спектр алгебраических исследований в Белгосунiversитете. Результаты В. П. Платонова о строении топологических групп подвели определенный итог исследованиям классов топологических групп, аналогичным соответствующим классам абстрактных групп, и знаменовали собой в значительной степени завершение развития этого направления. За цикл работ по топологическим группам В. П. Платонову в 1968 г. присуждена премия Ленинского комсомола.

Исследования математиков Белгосунiversитета по алгебре и алгебраической геометрии органически вписываются в исследования белорусской алгебраической школы. Результаты этих исследований отражены в работе, изданной к 50-летию АН БССР [3].

Это дает возможность в настоящей статье ограничиться обзором результатов, полученных математиками университета в области алгебры и алгебраической геометрии за последние пять лет (1977—1981). В редких случаях будут привлекаться более ранние работы.

На кафедре высшей алгебры Белгосунiversитета выполняются научные исследования по темам: линейные группы, алгебры и их приложения; исследования арифметических и структурных свойств алгебраических групп.

В результате исследований по первой теме найдена нормальная форма и максимальные порядки элементов симплектической группы над конечным полем; доказана неразрешимость проблем сопряженности и изоморфизма коммутативных матричных групп и алгебр, получено полное описание широкого класса графов, в конкретных категориях построены объекты и основные конгруэнции (М. С. Гаращук, Р. Т. Вольвачев, П. Т. Козел, И. А. Павлов, Р. И. Тышкевич, О. И. Мельников).

П. Т. Козелом [4] найден простейший вид матрицы изометрии пространства с симплектической метрикой над конечным полем характеристики $\neq 2$ и матрицы формы, определяющей метрику пространства, к которому они приводятся одновременно.

Р. И. Тышкевич занималась построением и развитием алгебраиче-

ских методов в комбинаторике и теории графов. В частности, рассматривались конкретные категории, в которых все объекты имеют транзитивные группы автоморфизмов. Для таких категорий построены объекты и основные конгруенции. Это редуцирует построение групп автоморфизмов и распознавание изоморфизма объектов рассматриваемых категорий к тому случаю, когда группа автоморфизмов регулярна. Первая работа этого направления, в которой изложена принципиальная схема, опубликована в 1975 г. [5].

О. И. Мельников занимается вопросами упорядочения на графах. Им получены свойства оптимальных расписаний задачи Беллмана — Джонсона, позволяющие находить все оптимальные расписания [6], изучались вопросы покрытия плоских фигур прямоугольниками [7]. В работе [8] рассматриваются параметрические задачи теории расписаний, в которых времена обслуживания являются функциями времени начала обслуживания. Получено решение параметрической задачи с монотонно возрастающей дифференцируемой функцией.

Особенно плодотворным было истекшее пятилетие в изучении арифметических и структурных свойств алгебраических групп. В результате исследования по теме получены результаты о числах и группах классов алгебраических групп, близкие к окончательным, описаны алгебраические группы, у которых группа всех бирациональных автоморфизмов является алгебраической, изучена приведенная группа Уайтхеда конечномерных тел над полями кратных степенных рядов и получен еще ряд результатов.

Продолжались исследования арифметических свойств алгебраических групп.

Арифметические группы являются основным объектом исследования арифметической теории алгебраических групп. В 1971 г. В. П. Платоновым получено принципиальное решение проблемы классификации максимальных арифметических подгрупп алгебраических групп, в основе которого лежит редукция к локальному случаю. В работе [9] автором статьи получена явная классификация максимальных арифметических подгрупп разложимых ортогональных групп типа (D_i) над одноклассным глобальным полем. Предварительно в этой работе получено явное решение локального аналога проблемы максимальной для разложимых ортогональных групп типа (D_i) над неархимедовым локально-компактным полем, характеристики не равной двум. Это, с учетом результатов полученных ранее, завершает явную классификацию максимальных арифметических подгрупп для простых классических групп над одноклассным глобальным полем.

Недавно получены результаты, относящиеся к описанию максимальных арифметических подгрупп полупростых групп компактного типа (А. А. Бондаренко).

Группы аделей являются основным техническим инструментом арифметической теории алгебраических групп. Важной арифметической характеристикой алгебраической группы является число двойных классов группы аделей. Проблема оценки числа классов алгебраических групп содержит в качестве частных случаев классические проблемы о числе классов в роде квадратичных форм, восходящей к Лагранжу и Гауссу, и о числе классов идеалов числовых полей. Работы [10—14] посвящены изучению чисел и групп классов алгебраических групп.

Пусть G — связная линейная алгебраическая группа степени n , определенная над полем алгебраических чисел K . Для произвольной матричной реализации $\varphi: G \rightarrow GL_r(\Omega)$ над полем K обозначим через $\varphi(G)_A$, $\varphi(G)_{A(\infty)}$, $\varphi(G)_K$ соответственно группы аделей, целых аделей, главных аделей группы $\varphi(G)$, и пусть $cl(\varphi(G))$ — число двойных классов $\varphi(G)_{A(\infty)} / \varphi(G)_A \setminus \varphi(G)_K$. Конечность числа $cl(\varphi(G))$ установлена А. Борелем.

В работе [10] изучается зависимость между числом $cl(G)$ и числом классов наиболее важных подгрупп группы G . Для произвольной пара-

болической K -подгруппы P редуktивной алгебраической K -группы G доказано неравенство $cl(G) \leq cl(P)$. Аналогичное соотношение имеет место для K -разложимых торов. В случае максимальных торов изучается зависимость между $cl(G)$ и $\min_T cl(T)$, где T — максимальный K -тор группы G . Подробно исследуется случай ортогональной группы G . На основании этого исследования устанавливается, что для произвольной полупростой K -группы G соотношение между $cl(G)$ и $\min_T cl(T)$ может быть разного характера.

Изучение зависимости между $cl(G)$ и числом классов максимальных торов продолжено в работе [12], в которой обобщаются результаты исследования зависимости между $cl(G)$ и $\min_T cl(T)$ для неопределенных полупростых групп G , доказан ряд любопытных утверждений для числа классов торов.

Как отмечено в [11], сильная аппроксимационная теорема позволяет редуцировать вычисление $cl(\varphi(G))$ к основному случаю редуktивной группы G . Вычисление $cl(\varphi(T))$ для алгебраического тора T представляется малореальной задачей. Для полупростых неопределенных групп ситуация оказывается иной.

Пусть $\pi: \bar{G} \rightarrow G$ универсальное накрытие и $m = |\ker \pi|$ порядок фундаментальной группы полупростой неопределенной группы G , тогда $cl(\varphi(G))$ является делителем числа вида m^d , $d \geq 0$. Основным результатом статьи [12] является доказательство того, что для полупростой неопределенной группы G и для всякого числа m^d , $d \geq 0$, существует такая K -реализация φ_d степени $2n$ группы G , что $cl(\varphi_d(G)) = m^d$. В этой же работе поставлен вопрос о реализации в качестве числа классов любого делителя числа m^d , т. е. числа вида $p_1^{a_1} \dots p_s^{a_s}$, где p_1, \dots, p_s — все различные простые делители m . Там же сформулирован и более тонкий вопрос: пусть f — показатель ядра F накрытия π , всякая ли конечная абелева группа экспоненты f реализуется в качестве группы классов $Gcl(\varphi(G))$? Для циклической группы положительный ответ на этот вопрос получен в [12]. В этой же работе для произвольной неодносвязной группы G доказано существование представления степени $2n$ со сколь угодно большим числом классов.

Центральным результатом статьи [13] является теорема реализации, согласно которой для полупростой неопределенной K -группы G в качестве группы классов $Gcl(\varphi(G))$ реализуется произвольная конечная абелева группа экспоненты f . В случае циклической фундаментальной группы для доказательства теоремы реализации достаточно представлений φ степени $2n$, в общей ситуации используются представления, степени которых больше $2n$.

Вопрос о реализации возможных чисел и групп классов на решетках степени n для любой неопределенной группы G остался пока открытым, важный факт о существовании одноклассных решеток любой размерности для произвольной полупростой неопределенной группы доказан в [12].

В работе [14] автором статьи доказаны теоремы реализации возможных чисел и групп классов на решетках степени n для неопределенных полупростых алгебраических K -групп G степени n в случаях, если G — одна из следующих групп: *i*) G — полупростая группа с циклической фундаментальной группой, обладающая билинейным симметрическим инвариантом, заданным на пространстве представления; *ii*) G — присоединенная алгебраическая группа, реализованная в качестве группы автоморфизмов соответствующей алгебры Ли $L(G)$; *iii*) G — простая классическая группа в канонической реализации. Построены необходимые локальные решетки в пространствах представления.

В работе [13] исследуется вопрос о числе классов полупростых групп, не являющихся неопределенными (групп компактного типа). Доказыва-

ется следующая общая теорема: если G — полупростая группа компактного типа степени n , то для всякого натурального r существует реализация φ_r группы G степени $2n$, что $cl(\varphi_r(G))$ делится на r .

Хохшильд и Мостов в 1969 г. нашли необходимые и достаточные условия для того, чтобы все бирациональные автоморфизмы алгебраической группы образовывали алгебраическую группу преобразований. А. А. Шарометом [15] найдены аналогичные условия для незамкнутого поля нулевой характеристики, а также указаны достаточные условия для того, чтобы группа всех бирациональных K -автоморфизмов алгебраической K -группы G была алгебраической группой преобразований. Для разрешимых групп найдены необходимые и достаточные условия.

Результаты исследований В. А. Липницкого лежат в русле приведенной K -теории, основы которой заложены в середине 70-х годов В. П. Платоновым. Он изучал строение приведенной группы Уайтхеда $SK_1(A)$ конечномерных центральных простых алгебр A над полями кратных степенных рядов $K = k \langle u_1 \rangle \langle u_2 \rangle \dots \langle u_m \rangle$.

Если k — алгебраически замкнуто; A — тело с центром K индекса n , причем $(n, \text{char } k) = 1$, то В. А. Липницким установлен критерий тривиальности $SK_1(A)$: группа $SK_1(A)$ тривиальна тогда и только тогда, когда A — циклическая алгебра. Во многих случаях оказывается $SK_1(A)$ тривиальна, когда k — поле вещественных алгебраических функций (см. [16]).

Ю. В. Тишиным исследовалась точная представимость матрицами свободного произведения групп $G_i, i = \overline{1, n}$ с объединенной подгруппой H в предположении, что $H \triangleleft G_i, i = \overline{1, n}$. Получены (см. [17]) необходимые условия существования в группе $G^* = \langle {}^*HG_i/i = \overline{1, n} \rangle$ нормального делителя, не содержащего нециклических свободных подгрупп. С помощью этих условий получены необходимые и достаточные условия существования вполне приводимых представлений некоторых обобщенных свободных произведений. Для случая, когда все G_i — абелевы группы, получен критерий представимости группы G^* . В частности, когда все G_i обладают представлением над полем характеристики нуль и являются периодическими абелевыми группами, то группа G^* всегда имеет точное линейное представление [18]. Когда все G_i — почти абелевы группы, получено несколько критериев точной представимости группы G^* при дополнительных условиях на H [19].

Активные исследования в области алгебры ведут доценты кафедры высшей математики факультета прикладной математики Г. В. Матвеев (изучение арифметических свойств классических групп) и В. М. Ширяев (инверсные полугруппы). Г. В. Матвеев вычислил спинорную норму автоморфизма центральной простой алгебры [20]. Этот результат применяется к изучению числа классов в роде решетки полной матричной алгебры. В. М. Ширяевым получено описание полурешеток ширины 2 с точностью до цепей [21]. Им рассматривались полурешетки конечной ширины n со сравнимыми разложимыми элементами. Предложен способ построения каждой такой полурешетки по некоторому допустимому набору цепей и деревьев ширины не более n [22]. В работе [23] введены аналоги понятий ядра и коядра, точных последовательностей, группы Эйлера — Гротендика, изучены некоторые свойства категории инверсных полугрупп.

Таким образом, за последнее пятилетие в БГУ имени В. И. Ленина был получен ряд глубоких и красивых результатов в области алгебры и алгебраической геометрии. Большую роль в этом сыграло руководство научными исследованиями на кафедре высшей алгебры выдающимся математиком, лауреатом Ленинской премии, академиком АН БССР В. П. Платоновым. В настоящее время он возглавляет ИМ АН БССР, где сосредоточены основные исследования в области алгебры и алгебраической геометрии, проводимые в Белоруссии. В развитии всесторон-

него сотрудничества с лабораториями алгебраического профиля Института математики АН БССР кафедра видит залог успехов в научных исследованиях.

ЛИТЕРАТУРА

1. См.: Боголюбов Н. Н.— В сб.: Октябрь и наука. М., 1977.
2. Нисневич В. Л.— Матем. сб., 1940, т. 8, с. 395.
3. Залесский А. Е., Конюх В. С. Алгебра и алгебраическая геометрия в работах математиков Белоруссии.— Минск, 1979.
4. Козел П. Т.— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1980, № 1, с. 63.
5. Тышкевич Р. И.— Матем. сб., 1975, т. 97, № 2, с. 262.
6. Мельников О. И.— Вестн. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, 1976, № 3, с. 19.
7. Мельников О. И.— Вестн. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, 1978, № 5, с. 134.
8. Мельников О. И., Шафранский Я. М.— Кибернетика, 1979, № 5, с. 53.
9. Бондаренко А. А.— Матем. сб., 1977, т. 102, № 2, с. 155.
10. Бондаренко А. А., Рапинчук А. С.— Докл. АН БССР, 1978, т. 22, № 5, с. 397.
11. Платонов В. П., Бондаренко А. А., Рапинчук А. С.— Докл. АН СССР, 1979, т. 245, № 1, с. 28.
12. Платонов В. П., Бондаренко А. А., Рапинчук А. С.— Изв. АН СССР. Сер. матем., 1979, т. 43, № 3, с. 603.
13. Платонов В. П., Бондаренко А. А., Рапинчук А. С.— Изв. АН СССР. Сер. матем., 1980, т. 44, № 2, с. 395.
14. Бондаренко А. А.— Докл. АН БССР, 1981, т. 25, № 9, с. 773.
15. Шаромет А. А.— Вестн. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук, 1976, № 3, с. 5.
16. Липницкий В. А.— Матем. заметки, 1978, т. 25, № 5, с. 629.
17. Тишин Ю. В.— Докл. АН БССР, 1980, т. 24, № 7, с. 581.
18. Тишин Ю. В. Там же, с. 7.
19. Тишин Ю. В.— Докл. АН БССР, 1981, т. 25, № 4, с. 297.
20. Матвеев Г. В.— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1980, № 1, с. 60.
21. Ширяев В. М.— Semigroup Forum, 1976, v. 2, p. 149.
22. Ширяев В. М.— Semigroup Forum, 1979, v. 17, p. 201.
23. Ширяев В. М.— Изв. вузов СССР. Матем., 1977, № 5, с. 125.

Кафедра высшей алгебры

УДК 518.5

Л. Н. БАТУРИНА, Н. А. ЛЕПЕШИНСКИЙ

ЗАДАЧА О МАКСИМАЛЬНОМ ПОТОКЕ ПРИ ИЗМЕНЕНИЯХ ПАРАМЕТРОВ СЕТИ

Пусть $G = (N, A, c)$ — сеть, у которой N — множество вершин с выделенным источником s и стоком t , A — множество ориентированных дуг вида (x_i, x_j) с заданными целочисленными неотрицательными пропускными способностями c_{ij} . Для данной сети любым из известных методов найдем максимальный поток из s в t . Пусть величина этого потока — V и соответствующие дуговые потоки — $f_{ij} \geq 0$. Предположим, что на одной из дуг $(x_{i_0}, x_{j_0}) \in A$ значение пропускной способности уменьшено до $c'_{i_0 j_0}$ так, что $0 \leq c'_{i_0 j_0} < f_{i_0 j_0}$. Обозначим новую сеть $G' = (N, A, c')$. Рассмотрим задачу эффективного определения величины максимального потока в сети $G' = (N, A, c')$ с использованием информации о максимальном потоке в исходной сети $G = (N, A, c)$. Будем придерживаться терминологии из [1].

Для любой дуги (x_i, x_j) исходной сети, не принадлежащей минимальному разрезу, который отделяет s от t , найдем минимальное значение пропускной способности c_{ij}^* , при котором величина V сохраняется. Для этого можно использовать следующую модификацию алгоритма [2] определения максимального потока в сети.

Алгоритм А. 1. Построение начального потока. На одном или нескольких путях из s в t уменьшаем потоки, соответствующие величине V , в общей сложности на f_{ij} .

2. Расстановка пометок. Вершине x_i присваиваем пометку $(+x_i,$

$\delta(x_i) = \infty$). Далее предполагаем, что вершина x_j не может помечаться непосредственно из x_i . Просмотр вершин и расстановку пометок можно производить так же, как и при решении задачи о допустимой циркуляции [2].

3. Расстановка пометок заканчивается в одном из трех случаев: а) помечена вершина t ; б) помечена вершина x_j ; в) вершина t (или x_j) не помечена и никаких других пометок расставить нельзя. В случаях а) и б) увеличиваем поток на найденном пути соответственно на значение δ_k , равное $\delta(t)$ или $\delta(x_j)$, и этап 2 повторяем. В случае в) алгоритм заканчивает работу.

Вычисляем значение c по формуле: $c = f_{ij} - f'_{ij}$,

где $f'_{ij} = \sum_{k=1}^l \delta_k$ и l — число проведенных этапов при расстановке пометок.

Покажем, что $c = c_{ij}^*$. В результате применения алгоритма A определяется величина потока f'_{ij} , которую можно добавить на всех обходных увеличивающих поток путях от x_i до t и от x_i до x_j , получив после этого некоторый максимальный поток величины $v' \leq v$. Нетрудно видеть, что $v' = v - f_{ij} + f'_{ij}$. Для сохранения значения v необходимо, чтобы по дуге от x_i до x_j проходил поток величины $v - v' = f_{ij} - f'_{ij} = c$. Из-за отсутствия путей из x_i в t , увеличивающих поток, дальнейшее уменьшение потока по дуге (x_i, x_j) приведет к уменьшению величины v . Это и доказывает, что $c_{ij}^* = c$ и следовательно,

$$c_{ij}^* = f_{ij} - f'_{ij}. \quad (1)$$

Из сказанного следует также

Утверждение. Величина максимального потока в сети $G' = (N, A, c')$ равна

$$v' = \begin{cases} v - [c_{i_0 j_0}^* - c'_{i_0 j_0}] & \text{при } 0 \leq c'_{i_0 j_0} < c_{i_0 j_0}^*; \\ v & \text{при } c_{i_0 j_0}^* \leq c'_{i_0 j_0} \leq f_{i_0 j_0}, \end{cases}$$

где $c_{i_0 j_0}^*$ определяется по формуле (1).

Пусть $\Gamma(x_k)$ и $\Gamma^{-1}(x_k)$ — соответственно множество концов и начал дуг, инцидентных вершине x_k , $c_k = \min \left(\sum_{x_i \in \Gamma^{-1}(x_k)} c_{ik}, \sum_{x_j \in \Gamma(x_k)} c_{kj} \right)$ — пропускная способность вершины x_k сети $G = (N, A, c)$; $f_k = \sum_{x_i \in \Gamma^{-1}(x_k)} f_{ik} =$

$= \sum_{x_j \in \Gamma(x_k)} f_{kj}$ — величина потока через вершину x_k сети $G = (N, A, c)$. Пред-

положим, что для некоторой вершины x_{k_0} сети $c_{k_0}^* = 0$. Обозначим такую сеть через $G'' = (N', A', c')$.

Следствие. Величина максимального потока в сети $G'' = (N', A', c')$ равна $v' = v \sum_{x_j \in \Gamma^{-1}(x_{k_0})} c_{jk_0}^*$, где величины $c_{jk_0}^*$ определяются по формуле (1).

Используем алгоритм A для определения значений $c_{ik_0}^*$, при которых дуги (x_i, x_{k_0}) (где $x_i \in \Gamma^{-1}(x_{k_0})$) одновременно войдут в минимальный разрез, соответствующий потоку величины v . При этом поток уменьшаем в общей сложности на f_{k_0} на путях из s в t , которые проходят через вершины $x_i \in \Gamma^{-1}(x_{k_0})$ и $x_j \in \Gamma(x_{k_0})$. Расстановка пометок производится в предположении, что вершина x_{k_0} не может помечаться непосредственно из вершин множества $\Gamma^{-1}(x_{k_0})$. Случай б) как признак окончания этапа 2 алгоритма понимается для любой вершины $x_j \in \Gamma(x_{k_0})$. Алгоритм применяется последовательно шаг за шагом для определения значений $c_{ik_0}^*$ дуг вида (x_i, x_{k_0}) в любом порядке. При этом достигнутые на предыдущих шагах значения дуговых потоков принимаются в качестве начальных значений на очередном шаге.

На основе приведенного утверждения и следствия из него можно построить алгоритм B определения величины максимального потока в сети $G' = (N, A, c')$ или $G'' = (N', A', c')$. Отличие его от алгоритма A состоит в том, что в новой сети необходимо определять обходные пути, увеличивающие поток, до тех пор пока не будет впервые достигнуто условие $\sum_{k=1}^l \sigma_k \geq f_{i_0 j_0} - c'_{i_0 j_0}$ для сети $G' = (N, A, c')$ или условие $\sum_{i \in I^{-1}(x_{k_0})} \sum_{j=1}^m \sigma_{ij} \geq \geq f_{k_0}$ для сети $G'' = (N', A', c')$.

Пусть (x_i, x_j) — дуга сети $G = (N, A, c)$, $f_{ij} = c_{ij}$, $c_{ij}^{**} \geq c_{ij}^*$ — значение пропускной способности дуги (x_i, x_j) , при котором возможно максимальное увеличение величины v при условии сохранения пропускных способностей остальных дуг сети.

Легко видеть, что задача определения значения c_{ij}^{**} для дуги (x_i, x_j) сводится к нахождению всех увеличивающих поток путей от s до x_i и от x_j до t . Тогда, если на путях от s до x_i можно добавить поток величины δ_1 , а на путях от x_j до t величины δ_2 , то

$$c_{ij}^{**} = c_{ij} + \sigma, \quad (2)$$

где $\delta = \min(\delta_1, \delta_2)$.

Для определения значений δ_1 и δ_2 используем следующий

Алгоритм С. 1. Начальный поток на дугах сети соответствует найденному максимальному потоку.

2. Расстановка пометок. 1-й шаг. Вершине x_j присваиваем пометку $(+x_j, \delta(x_j) = \infty)$. Полагаем, что вершина x_i не может помечаться непосредственно из x_j . Далее просмотр вершин, расстановка пометок и процесс окончания расстановки пометок производится, как и в алгоритме определения максимального потока.

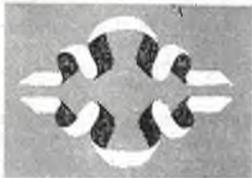
Вычисляем $\delta_2 = \sum_{k=1}^l \delta_k$, где l — число проведенных этапов при расстановке пометок. 2-й шаг. Вершине x_i присваиваем пометку $(+x_i, \delta(x_i) = \infty)$. Процесс расстановки осуществляется для вершин $x_j \in \Gamma^{-1}(x_i)$, у которых $f_{ji} < c_{ji}$. Процесс расстановки пометок заканчивается, если помечена вершина s , или вершину s пометить нельзя. Вычисляем $\delta_1 = \sum_{k=1}^m \delta_k$, где m — число проведенных этапов при расстановке пометок.

Из-за того, что начальные потоки в алгоритмах A, B, C равны максимальному или близки к нему и что процесс расстановки пометок охватывает лишь часть вершин сети, предложенные алгоритмы A, B, C эффективнее, чем алгоритм определения максимального потока, применяемый непосредственно на сети G' или G'' .

ЛИТЕРАТУРА

1. Кристофидес Н. Теория графов. Алгоритмический подход.— М., 1978.
2. Форд П. Р., Фалкерсон Д. Р. Потоки в сетях.— М., 1962.

Кафедра математического обеспечения АСУ



Наши юбиляры

ФЕДОР ИВАНОВИЧ ФЕДОРОВ (К 70-летию со дня рождения)

Исполнилось семьдесят лет Федору Ивановичу Федорову — известному советскому физико-теоретнику и организатору науки, создателю обширной научной школы, старейшине белорусских физиков.

Родился Федор Иванович в деревне Турец Гродненской области в семье учителя (известного белорусского писателя Янки Мавра). После окончания Белорусского государственного университета Ф. И. Федоров преподавал физику и математику в педагогическом техникуме г. Кричева.

1933 г. — поистине счастливое начало научного пути Федора Ивановича: он был направлен в аспирантуру Ленинградского университета, где стал работать под руководством выдающегося физика-теоретика В. А. Фока. Одержимый наукой одаренный аспирант в короткий срок творчески осваивает основные идеи квантовой электродинамики и выполняет первое самостоятельное научное исследование, положенное в основу его кандидатской диссертации, защищенной в 1936 г. Под благотворным влиянием академика В. А. Фока сформировался научный стиль молодого белорусского ученого. Органическое сочетание широты спектра исследуемых физических проблем с изяществом используемых математических методов — отличительная особенность научного творчества Ф. И. Федорова.

Возвратившись в Минск, Ф. И. Федоров всю свою энергию, талант ученого и педагогический дар отдает организации учебного процесса и развертыванию научно-исследовательских работ на физико-математическом факультете БГУ. С момента создания в 1938 г. и до 1962 г. он возглавляет кафедру теоретической физики; в настоящее время Федор Иванович — профессор этой кафедры. В трудные военные и послевоенные годы (1943—1950) Ф. И. Федоров — декан факультета.

В научном творчестве Федора Ивановича можно выделить три основных направления: кристаллооптику, кристаллоакустику и теорию элементарных частиц, которые связаны между собой единством подхода и оригинальностью математических идей. Последовательное применение прямых (бескоординатных) методов тензорного и матричного исчисления позволило ему получить ряд блестящих научных результатов в каждой из этих областей.

Виднейшее место в научной деятельности Ф. И. Федорова занимают исследования по оптике анизотропных сред. Федор Иванович создал общую и завершенную теорию распространения электромагнитных волн в средах, обладающих всевозможными видами анизотропии. Ему принадлежит заслуга в создании оптики прозрачных магнитных кристаллов. Впечатляющим достижением Ф. И. Федорова является развитие общей теории неоднородных волн, т. е. таких затухающих волн, у которых направление фазовой нормали и направление убывания амплитуды не совпадают. Федору Ивановичу удалось получить ряд фундаментальных выводов; особый интерес представляет предсказание нового оптического эффекта — бокового смещения луча при полном отражении («сдвиг Федорова»), подтвержденное на опыте. Это новое физическое явление в 1980 г. зарегистрировано в качестве научного открытия.



Результаты исследований по теоретической кристаллооптике изложены в монографии Ф. И. Федорова «Оптика анизотропных сред» (1958), ставшей классической. Важные для практики вопросы этой теории изложены в книге Ф. И. Федорова и В. В. Филиппова «Отражение и преломление света прозрачными кристаллами» (1976).

За цикл работ по оптике анизотропных сред Ф. И. Федорову в 1976 г. была присуждена Государственная премия СССР.

Федор Иванович совместно с учениками создал стройную теорию оптических свойств гиротропных сред. Изданная в 1976 г. его монография «Теория гиротропии» подвела итог этим исследованиям и является самым современным руководством по теории оптических свойств кристаллов, имеющих всевозможные виды анизотропии.

Значительные результаты принесло Ф. И. Федорову применение ковариантных методов в целях развития общей теории распространения упругих волн в однородных кристаллических средах любой симметрии. Его книга «Теория упругих волн в кристаллах», вышедшая в 1965 г. (американское издание — в 1968 г.), — первая в мировой литературе монография по данному вопросу, ставшая настольной книгой для специалистов в этой области физики.

Цикл работ Ф. И. Федорова по теории распространения упругих волн в кристаллах отмечен в 1972 г. Государственной премией БССР.

Предметом особого внимания Ф. И. Федорова на протяжении всей научной деятельности являются вопросы теории элементарных частиц, в подходе к которым он применяет и совершенствует все те же ковариантные методы.

Ф. И. Федоровым построена теория релятивистских волновых уравнений для частиц с произвольными значениями спина и массы, разработан общий метод проективных операторов в теории взаимодействия элементарных частиц, создана комплексно-векторная параметризация группы Лоренца, придавшая совершенно иной облик релятивистской кинематике. Недавно вышедшая фундаментальная монография Ф. И. Федорова «Группа Лоренца» (1979), где излагается развитый им метод, не имеет аналогов в существующей обширной литературе по данному вопросу.

Ф. И. Федорову принадлежит ряд работ по общей теории относительности. Он показал, в частности, что уравнения гравитации Эйнштейна могут быть сформулированы в виде универсальных матричных уравнений первого порядка с квадратичной нелинейностью.

Неисчерпаемость и плодотворность научных идей Федора Ивановича, его яркий педагогический талант постоянно привлекают к нему молодых исследователей. Федор Иванович воспитал плеяду физиков-теоретиков, составивших ядро каждой из созданных им научных школ. Многие его ученики стали известными учеными, создавшими собственные направления в науке, и сами руководят теперь крупными исследовательскими коллективами. Блестящие лекции Федора Ивановича по различным разделам теоретической физики, которые он активно читает и в настоящее время, оказывают большое влияние на формирование будущих физиков.

Много сил и энергии Ф. И. Федоров отдает научно-организационной и общественной работе. Он был одним из инициаторов создания и организатором в 1955 г. Института физики и математики АН БССР. Бессменно возглавляемая им вот уже 26 лет лаборатория теоретической физики стала одним из ведущих подразделений Института физики АН БССР. С 1963 г. Ф. И. Федоров руководит Отделением физико-математических наук АН БССР, которое объединяет четыре крупных института.

За выдающийся вклад в развитие науки Ф. И. Федорову присвоено высокое звание Героя Социалистического Труда, он удостоен почетного звания заслуженного деятеля науки БССР, награжден орденами и медалями.

Если попытаться выделить основную линию той огромной рабочей и общественной нагрузки, которую с честью несет Федор Иванович в течение всех 50 лет неутомимой и многогранной деятельности, то нужно подчеркнуть, что он всегда был и остается в первую очередь ученым-исследователем, для которого научное творчество является естественным и единственно возможным способом существования.

Глубина и неиссякаемость научного потенциала, высокая восприимчивость к новым идеям, удивительная, не ослабевающая с годами творческая активность, непередаваемое обаяние его личности вызывают восхищение и глубокое уважение всех, кто его окружает. Свое семидесятилетие Федор Иванович Федоров встречает в расцвете духовных сил и научного таланта. Он полон идей и творческих замыслов, органически присущих ему жизнелюбия и оптимизма.

Поздравляя Федора Ивановича с юбилеем, от всей души желаем ему крепкого здоровья, неизменной бодрости, новых выдающихся успехов и свершений.

УКАЗАТЕЛЬ
статей, опубликованных в «Вестнике Белорусского университета», серия I
«Физика, математика и механика» в 1981 году

ФИЗИКА

Агранов Г. А., Зайцева А. М., Коренная Л. И., Соболев В. С. Исследование алгоритмов сокращения информации при использовании преобразований Услша — Адамара	1	10
Анищик В. М., Гуманский Г. А., Драко В. М. Изменение электросопротивления имплантированных пленок меди и железа при отжиге	1	3
Барковский Е. В., Прокошина Н. А., Ховратович Н. Н., Черенкевич С. Н. Спектрально-люминесцентные характеристики тромбина	3	
Воропай Е. С., Саржевский А. М., Торпачев П. А. К вопросу об определении сечений двухфотонного поглощения внутрирезонаторным методом	2	21
Воропай Е. С., Гайсенко В. А., Саечников В. А., Саржевский А. М. Влияние ориентационной дипольной релаксации на спектрально-люминесцентные свойства растворов сложных молекул в условиях взаимодействия с лазерным излучением	3	
Глазков Ю. В., Врублевский А. И., Зотов Н. И., Беляцкая Н. М. ЭПР стабилизированных радикалов в фотореакциях с участием порфиринов	2	18
Граков В. Е., Майга А. С. Влияние продольного магнитного поля на катодное падение потенциала и устойчивость электрических вакуумных дуг	1	27
Громенко Г. И., Лойко В. И., Некрашевич И. Г. Зависимость распределения напряжений от природы изгибающих сил в двухслойных системах	1	25
Данилов В. А., Зенченко С. А., Шаронов Г. В. Спектральные и временные характеристики излучения аргонового лазера в режиме синхронизации мод	1	31
Зажокин А. П., Комяк А. И., Титков Е. Ф. Природа «мультиплетной» структуры низкотемпературных спектров кристаллов соединений уранила	3	
Зятьков И. П., Княжевич Н. Д., Сагайдак Д. И., Парфианович Н. В. Роль весовой функции и фонового вклада в формировании кривой ошибок при количественном анализе по спектрам поглощения	1	17
Зятьков И. П., Пицевич Г. А., Сагайдак Д. И. О корреляции спектральных и технологических характеристик пероксидов ацилов	3	
Карась В. И., Кольченко Т. И., Ломако В. М., Новоселов А. М. Прямые экспериментальные доказательства подвижности первичных радиационных дефектов в GaAs	3	
Коляда А. А. Структура быстродействующих АУ в обобщенных СОК	1	19
Коляда А. А., Чернявский А. Ф. Быстродействие АУ в обобщенных СОК	2	12
Коляда А. А., Кравцов В. К. О некоторых вопросах реализации арифметики обобщенных СОК	2	3
Кривошеев Н. К., Стельмах В. Ф. Применение дроссельного СВЧ перехода в криостате	2	32
Лаппо О. И., Шавель Н. Н., Щорс Л. С. Источник импульсов накачки инжекционных ПКГ для широкополосных цифровых оптических линий связи	2	29
[Лаврукович В. И.], Сидоренко А. В. Волоконно-оптическая линия связи для передачи СВЧ сигнала по лучу лазера	2	16
Личко Г. П. Быстрое преобразование Фурье больших массивов	1	14
Лукашевич М. Г., Стельмах В. Ф. Особенности низкотемпературного примесного пробоя в эпитаксиальном арсениде галлия	3	
Мургада Х. А., [Гуманский Г. А.], Углов В. В. Отражение и рассеяние рентгеновского излучения поверхностью кремния с различной степенью шероховатости	2	34

Прима А. М., Прима В. М. Применимость модели эффективных зарядов и отношение интенсивностей полос в ИК спектрах, обусловленных валентными и деформационными колебаниями	1	6
Прима А. М., Прима В. М. Расчет параметров, определяющих интенсивности ИК полос этилена по модели эффективных зарядов, и взаимосвязь интенсивностей валентных и деформационных частот	2	7
Слепян Г. Я., Фурса Е. Я., Шушкевич С. С. Топография магнитно-резонансных характеристик больших плоских образцов	3	
Хапалюк А. П. Полное резонансное поглощение электромагнитных волн в цилиндре	2	25
Хапалюк А. П. Полное резонансное поглощение электромагнитных волн в однородном шаре	3	
Фам Чонг Хьен, Ханох Б. Ю., Хапалюк А. П. Особенности генерации в резонаторе с тетраэдрическим призмным отражателем	1	33

МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

Антонович С. П., Гришанович А. П., Колесник Т. И., Орехов Н. И. Метод выделения трендов нестационарного процесса	2	50
Батурина Л. Н., Лепешинский Н. А. Задача о максимальном потоке при изменениях параметров сети	3	
Бобков В. В. Численные методы с улучшенными свойствами согласованности дифференциальной и разностной задач	3	
Бондаренко А. А. Алгебра и алгебраическая геометрия в работах математиков БГУ имени В. И. Ленина	3	
Габасов Р., Кириллова Ф. М., Костюкова О. И. Модификация адаптивного метода решения общей задачи линейного программирования	2	37
Габасов Р. Вопросы конструктивной теории оптимального управления	3	
Гахович А. С. Оригиналы Лапласа — Эйлера со степенной особенностью целого типа в нуле	2	59
Громак В. И., Пилипчук Л. А., Бачурина Е. В. О распределении полюсов решения второго уравнения Пенлеве	1	38
Давори М. И., Калинин А. И. Об одном необходимом условии оптимальности особых управлений	1	64
Дробушевич Г. А., То Туан. О структурном программировании на языке Ассемблер	1	40
Ерошенко Л. Д. Об одном алгоритме улучшения допустимых управлений в системах с запаздыванием	1	55
Ерошенко В. А. Алгебраически определенные негипонормальные операторы	2	48
Журбенко И. Г., Труш Н. Н. Спектральный анализ случайных стационарных процессов	1	58
Зверович Э. И. Задача Карлемана на римановой поверхности с краем и отображение круговых многоугольников	3	
Зуев Н. М. Оценка ковариаций случайных величин, удовлетворяющих условию Крамера и перемешиванию «по Ибрагимову»	2	42
Калитин Б. С. К устойчивости разрывных предельных циклов двумерных автономных систем	2	44
Леваков А. А. Зависимость оптимального значения критерия качества от граничных условий	1	46
Леваков А. А. Некоторые свойства решений дифференциальных включений в банаховом пространстве	2	54
Мережа В. Л. К управляемости систем с запаздыванием	1	61
Медведев Г. А. Адаптивное оценивание при зависимых выборках	3	
Примачук Л. П. Нелинейная задача сопряжения на разомкнутой дуге для двух голоморфных функций	1	44
Прусов И. А., Савенков В. А. Интегральное уравнение контактной задачи теории упругости для изотропной полосы	2	57
Прусов И. А., Василевич Ю. В. Об одном представлении общих формул теории упругости ортотропного тела	3	
Пыжкова Н. В. Решение проблемы изохронности центра для одной системы нелинейных колебаний	1	52
Феденя М. М. Об экстремальном возмущении квазихарактеристических чисел и квазимультимпликаторов	1	49

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Афанасьев Г. К., Лебедев В. И., Оранский А. М. К измерению расстояния между точкой и заданной прямой на плоскости	1	67
Белявский С. С. О периодических перестановочных решениях двух систем дифференциальных уравнений	1	69
Буза М. К. О мультипликативном переполнении в коде вычетов	2	63
Городецкий Л. М. Квазиобратные матрицы и решение систем линейных алгебраических уравнений	2	65

<i>Клевченя А. А.</i> Об одном методе численного решения задачи вытеснения неньютоновской жидкости водой	1	70
<i>Малыхина Г. И.</i> «Формы строгой науки» Р. Грассмана и их отношение к естественному языку	1	72
<i>Прасолов А. В.</i> О теореме Герстена для градуированных колец	2	62
<i>Шалима В. Н.</i> Двухшаговые методы решения систем квазилинейных уравнений второго порядка специального вида	2	66
Аннотации депонированных статей	1	75
Аннотации депонированных статей	2	69

НАШИ ЮБИЛЯРЫ

Илья Григорьевич Некрашевич (К 75-летию со дня рождения)	1	74
Федор Иванович Федоров (К 70-летию со дня рождения)	3	

ПАМЯТИ УЧЕНОГО

<u>Андрей Капитонович Красин</u>	2	73
<u>Иван Иванович Комяк</u>	1	77

РЕФЕРАТЫ

УДК 535.37

Е. С. Воропай, В. А. Гайсенко, В. А. Саечников, А. М. Саржевский. **Влияние ориентационной дипольной релаксации на спектрально-люминесцентные свойства растворов сложных молекул в условиях взаимодействия с лазерным излучением.**—Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Обсуждается влияние межмолекулярной релаксации на характеристики поглощения и испускания растворов молекул, взаимодействующих с интенсивным лазерным излучением. Приводится общая схема расчета населенностей состояний с учетом релаксации окружения примесных молекул. Рассматриваются различные случаи проявления релаксации в спектрально-люминесцентных свойствах растворов. Приводятся результаты экспериментального исследования таких проявлений при световом тушении и интенсивном возбуждении.

Библ. 15 назв., ил. 5.

УДК 546.791.6+535.343

За жогин А. П., Комяк А. И., Титков Е. Ф. **Природа «мультиплетной» структуры низкотемпературных спектров кристаллов соединений уранила.**—Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Исследована природа «мультиплетной» структуры спектров люминесценции и поглощения кристаллов тринитратных соединений уранила при низкой температуре. Установлено, что наблюдаемая «мультиплетная» структура обусловлена суперпозицией спектров отдельных центров свечения. Эти центры являются молекулами кристалларастворителя и изоморфной примеси, расположенными вблизи друг друга. Получены уравнения для определения частот чисто электронных переходов в различных типах дефектных и примесных центров.

Библ. 14 назв., ил. 3, табл. 2.

УДК 547.96.535.37

Барковский Е. В., Прокошина Н. А., Ховратович Н. Н., Черенкевич С. Н. **Спектрально-люминесцентные характеристики тромбина.**—Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Проведено исследование электронных спектров поглощения и собственной флуоресценции тромбина крупного рогатого скота с целью изучения конформационных состояний. Показано, что спектры поглощения и флуоресценции тромбина в трис-HCl буфере при pH 7,5 обусловлены в основном триптофанами. Характер спектра флуоресценции (положение максимума остатков 333 нм и полуширина 62 нм) указывает на большую гетерогенность остатков триптофана. Исследование pH зависимости спектров флуоресценции позволило констатировать конформационные переходы тромбина в областях pH 10—12 и 3,7—2,5. Наиболее устойчивое состояние тромбина реализуется при pH 6,1. Спектры флуоресценции тромбина весьма чувствительны к изменениям конформации молекул.

Библ. 13 назв., ил. 3, табл. 1.

УДК 532.783 : 535.33

Зятьков И. П., Пицевич Г. А., Сагайдак Д. И. **О корреляции спектральных и технологических характеристик пероксидов ацилов.**—Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Исследованы колебательные спектры симметричных и несимметричных ароматических и арилатических пероксидов ацилов. Установлено, что изменение частот максимумов полос $\nu_{C=O}$ в КР и ИК спектрах связано функциональной зависимостью с σ -константами заместителей, константами термоустойчивости и константами иницирования. В пределах одного гомологического ряда эти зависимости позволяют по спектральным характеристикам предсказывать важные технологические параметры диацильных пероксидов.

Библ. 14 назв., ил. 3, табл. 1.

УДК 620.183(088.8)

Слепьян Г. Я., Фурса Е. Я., Шушкевич С. С. **Топография магнитно-резонансных характеристик больших плоских образцов.**—Вестн. Белорусского ун-та. Сер. I, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Предложен способ контроля физических параметров больших плоских образцов методом электронного магнитного резонанса. Описаны микроволновые резонаторы, позволяющие при незначительном уменьшении чувствительности радиоспектрометра получать спектры ЭПР от локальных участков образцов, не налагая существенных ограничений на их размеры.

Библ. 14 назв., ил. 3.

УДК 621.315.592

Карась В. И., Кольченко Т. И., Ломако В. М., Новоселов А. М. **Прямые экспериментальные доказательства подвижности первичных радиационных дефектов в GaAs.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Исследовались процессы миграции и перераспределения точечных дефектов в GaAs в ходе облучения и последующего термического отжига. Получены прямые экспериментальные доказательства подвижности некоторых типов первичных дефектов при $T = 300$ К. Оценена энергия активации миграции. Из совокупности экспериментальных результатов сделано заключение, что основные типы стабильных при $T = 300$ К изолированных радиационных дефектов не являются простейшими точечными дефектами, а представляют собой комплексы из собственных структурных нарушений.

Библ. 5 назв., ил. 3.

УДК 535.44 : 537.868.4

Халпалюк А. П. **Полное резонансное поглощение электромагнитных волн в однородном шаре.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Теоретически изучаются условия реализации полного резонансного взаимодействия поглощающего вещества однородного шара с электромагнитным полем собственных типов колебаний шара. Сущность явления сводится к полному поглощению падающих на цилиндр соответствующих сферических волн.

Библ. 2 назв.

УДК 621.315.592

Лукашевич М. Г., Стельмах В. Ф. **Особенности низкотемпературного примесного пробоя в эпитаксиальном арсениде галлия.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Приводятся результаты изучения низкотемпературного примесного пробоя при $T = 4,2$ К в нелегированном и легированном мелкой примесью арсениде галлия с концентрацией свободных носителей $3,14 \cdot 10^{14} - 1,2 \cdot 10^{17}$ см⁻³. Изменение протяженности области отклонения от закона Ома на вольтамперной характеристике с ростом легирования в предпробойных электрических полях связано с образованием и развитием примесной зоны.

Библ. 5 назв.

УДК 539.3

Пруссов И. А., Василевич Ю. В. **Об одном варианте представления общих формул теории упругости ортотропного тела.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Для ортотропного трехмерного тела, находящегося в упругом равновесии при отсутствии массовых сил, получены выражения для напряжений и перемещений в виде суммы двух групп основных формул с тремя и шестью ограничениями на коэффициенты упругости соответственно. В предельном случае при переходе к изотропному телу напряжения и перемещения преобразуются в бигармонические функции, зависящие от трех произвольных бигармонических и трех гармонических функций.

Библ. 2 назв., ил. 1.

УДК 62-50

Медведев Г. А. **Адаптивное оценивание при зависимых выборках.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Приводится задача оценивания значений неизвестных параметров по ходу получения наблюдений в текущем времени в условиях, когда эти наблюдения являются коррелированными. Обсуждаются вопросы построения и исследования оценок параметров в этих условиях по методу наименьших квадратов и по типу стохастической аппроксимации. Рассматривается сложность оценок в вычислительном отношении, а также проблема состоятельности оценок параметров сдвига.

Библ. 5 назв.

УДК 517.544.8.545

Зверович Э. И. **Задача Карлемана на римановой поверхности с краем и отображение круговых многоугольников.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Дается постановка и приводятся некоторые результаты по теории задачи Карлемана (о скачке) $\varphi[\alpha(t)] - \varphi(t) = g(t)$ на римановой поверхности с краем. На основе этих результатов предлагается метод построения функций, конформно отображающих круговые многоугольники специального вида на полуплоскость, не требующих вычисления аксессуарных параметров. Метод демонстрируется на примерах.

Библ. 4 назв., ил. 2.

УДК 517.966

Габасов Р. **Вопросы конструктивной теории оптимального управления.**— Вестн. Белорусского ун-та, Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Обсуждаются проблемы построения алгоритмов решения задач оптимального управления. Формулируется критерий субоптимальности в форме принципа ϵ -максимума. Приводится пример.

Библ. 10 назв.

УДК 519.62

Бобков В. В. **Численные методы с улучшенными свойствами согласованности дифференциальной и разностной задач.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Для численного решения задач с начальными условиями в случае жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений предлагаются новые явные и неявные нелинейные методы разных порядков точности, характеризующиеся улучшенными свойствами устойчивости (в том числе A -устойчивые и спектрально-устойчивые методы). Указывается на возможность использования предлагаемых методов при построении разностных схем в случае уравнений с частными производными.

Библ. 8 назв.

УДК 512

Бондаренко А. А. **Алгебра и алгебраическая геометрия в работах математиков БГУ имени В. И. Ленина.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ., мат. и мех., 1981, № 3.

Отражены результаты, полученные математиками университета в области алгебры и алгебраической геометрии за последние пять лет (1977—1981).

Библ. 23 назв.

УДК 518.5

Батурина Л. Н., Лепешинский Н. А. **Задача о максимальном потоке при изменении параметров сети.**— Вестн. Белорусского ун-та. Сер. 1, физ. мат. и мех., 1981, № 3.

Предлагается модифицированный метод пометок для определения величины максимального потока в сети при изменении пропускной способности дуги или вершины.

Библ. 2 назв.

К сведению подписчиков журнала

«Вестник БГУ им. В. И. Ленина.

Серия I, физика, математика и механика».

В связи с увеличением стоимости печатных сортов бумаги с января 1982 г. розничная цена одного номера журнала составит 95 коп. Стоимость отдельной серии на год — 2 руб. 85 коп.