

ВЕСЦІ

НАЦЫЯНАЛЬНАЯ АКАДЭМІЯ НАВУК БЕЛАРУСІ

СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК 2016 № 2

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

СЕРИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК 2016 № 2

ЗАСНАВАЛЬНІК – НАЦЫЯНАЛЬНАЯ АКАДЭМІЯ НАВУК БЕЛАРУСІ

Часопіс выдаецца са студзеня 1965 г.

Выходзіць чатыры разы ў год

ЗМЕСТ

МАТЭМАТЫКА

Гайшун І. В., Горячкин В. В. Робастная и интервальная наблюдаемость двухпараметрических дискретных систем с интервальными коэффициентами	6
Чумаков Ф. В., Василец С. И. Об одном интегральном уравнении первого рода с полярно-логарифмическим ядром	10
Янович Л. А., Гуло И. Н. Вычисление моментов случайных процессов, задаваемых тригонометрическими функциями от броуновского движения	16
Корзюк В. И., Пузырный С. И. Классическое решение смешанных задач для одномерного волнового уравнения с негладкими условиями Коши	22
Янчевский В. И. Группы Уайтхеда, приведенные нормы и цикличность специальных алгебр Адзумаи	32
Харин Ю. С., Палуха В. Ю. Статистические оценки энтропии Реньи и Тсаллиса и их использование для проверки гипотез о «чистой случайности»	37

ФІЗІКА

Веко О. В., Войнова Я. А., Овсюк Е. М. Частица со спином 1/2 и аномальным магнитным моментом в кулоновском поле	48
Савастенко Н. А., Филатова И. И., Люшкевич В. А., Чубрик Н. И., Габдуллин М. Т., Рамазанов Т. С., Абдуллин Х. А., Калкозова Ж. К. Оптические и структурные свойства фотокатализаторов на основе ZnO	57

Левчук Е. А., Макаренко Л. Ф. Влияние магнитного поля на локализацию волновой функции электрона в системе нанозатвор–донор	68
Батище С. А., Бушук С. Б., Кузьмук А. А., Савич А. В., Татур Г. А., Грабнер Г., Котэк В. Оценка эффективного коэффициента поглощения роговицы глаза на длине волны 213 нм из абляционных измерений.....	76
Апанасевич П. А., Дашкевич В. И., Тимофеева Г. И. Сравнение лучевых нагрузок на торцы нелинейных кристаллов в ПГС с кольцевым резонатором	80

ІНФАРМАТЫКА

Соболевский П. И., Баханович С. В. Двухуровневый тайлинг и его применение при пространственно-временном отображении алгоритмов на параллельные архитектуры.....	85
Черемисинова Л. Д. Модели и алгоритмы оценивания среднего значения мощности, потребляемой последовательностными КМОП-схемами.....	98
Сергеев Р. С., Ковалев И. С. Поиск мутаций в геномных последовательностях <i>M. tuberculosis</i> , связанных с лекарственной устойчивостью	109

КАРОТКІЯ ПАВЕДАМЛЕННІ

Зверович Э. И. Два обобщения полигамма-функций.....	115
--	-----

ВУЧОНЫЯ БЕЛАРУСІ

Буракоў Віктар Сямёнавіч (Да 85-годдзя з дня нараджэння).....	119
Томильчик Лев Митрофанович (К 85-летию со дня рождения).....	123
Правила для авторов.	126

ІЗВЕСТЫЯ НАЦІОНАЛЬНАЙ АКАДЕМІІ НАУК БЕЛАРУСІ 2016 № 2

Серія фізіка-матэматычных навук

На руском, беларуском і англійском языках

Журнал зарэгістраван у Міністэрстве інфармацыі Рэспублікі Беларусь,
свідетельства о рэгістрацыі № 392 от 18.05.2009

Камп'ютарная вёрстка *В. А. Тоўстай*

Здадзена ў набор 01.06.2016. Падпісана да друку 20.06.2016. Выхад у свет 24.06.2016. Фармац 60×84¹/₈.

Папера афсетная. Друк лічбавы. Ум. друк. арк. 14,88. Ул.-выд. арк. 16,4. Тыраж 70 экз. Заказ 127.

Кошт нумару: індывідуальная падпіска – 102 900 руб.; ведамасная падпіска – 252 168 руб.

Выдавец і паліграфічнае выкананне:

Рэспубліканскае ўнітарнае прадпрыемства «Выдавецкі дом «Беларуская навука». Пасведчанне аб дзяржаўнай рэгістрацыі выдаўца, вытворцы, распаўсюджвальніка друкаваных выданняў № 1/18 ад 02.08.2013.

ЛП 02330/455 ад 30.12.2013. Вул. Ф. Скарыны, 40, 220141, г. Мінск.

© Выдавецкі дом «Беларуская навука».

Весці НАН Беларусі. Серія фізіка-матэматычных навук, 2016

PROCEEDINGS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

PHYSIC AND MATHEMATICS SERIES 2016 N 2

FOUNDED IS THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

The Journal has been published since January 1965

Issued four times a year

CONTENTS

MATHEMATICS

Gaishun I. V., Goryachkin V. V. Robust and interval observability of two-dimensional discrete systems with interval coefficients.....	6
Chymakov F. V., Vasilets S. I. First-kind integral equation with polar-logarithmic kernel	10
Yanovich L. A., Gulo I. N. Calculation of moments of stochastic processes defined by trigonometric functions of Brownian motion.....	16
Korzyuk V. I., Puzyrnyi S. I. Classical solution of mixed problems for the one-dimensional wave equation with Cauchy nonsmooth conditions.....	22
Yanchevskii V. I. Whitehead groups, reduced norms and cyclicity of some special Azumaya algebras.....	32
Kharin Yu. S., Palukha U. Yu. Statistical estimates of Renyi and Tsallis entropy and their use for testing the hypotheses of “pure randomness”.....	37

PHYSICS

Veko O. V., Voynova Y. A., Ovsyuk E. M. Spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment in the Coulomb field.....	48
Savastenko N. A., Filatova I. I., Lyushkevich V. A., Chubrik N. I., Gabdullin M. T., Ramasanov T. S., Abdullin Kh. A., Kalkosova Zh. K. Optical and structural properties of ZnO-based photocatalysts.....	57
Levchuk E. A., Makarenko L. F. Effect of a magnetic field on the electron wave function relocation in the nanogate – donor system	68
Batishche S. A., Bushuk S. B., Kouzmouk A. A., Savitch A. V., Tatur H. A., Grabner G., Kautek W. Estimation of cornea effective absorption coefficient at 213 nm from ablation measurements	76
Apanasevic P. A., Dashkevich V. I., Timofeeva G. I. Comparison of beam loads on end face of nonlinear crystals in ring cavity opo.....	80

INFORMATICS

Sobolevsky P. I., Bakhanovich S. V. Two-level tiling and its application in the space-time mapping of algorithms onto parallel architectures.....	85
Cheremisinova L. D. Models and algorithms for estimation of average power consumed by sequential CMOS circuits.....	98
Sergeev R. S., Kavaliou I. S. Search for drug-resistance mutations in <i>M. tuberculosis</i> genome sequences.....	109

SHORT NOTES

Zverovich E. I. Two generalizations of polygamma-functions	115
---	-----

SCIENTISTS OF BELARUS

Burakov Viktor Semenovich (85th anniversary of the birth).....	119
Tomilchik Lev Mitrofanovich (85th anniversary of the birth).....	123
Instructions for Authors	126

ОТ РЕДАКЦИИ

Уважаемые авторы и читатели журнала!

Спасибо, что вы с нами и что высокий научный уровень ваших публикаций делает наше издание интересным и востребованным.

Со своей стороны редакция также стремится не останавливаться на достигнутом и предпринимает все возможное, чтобы журнал, который уже отметил свое 50-летие, развивался и был современным.

Вы уже знаете, что «Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук» входят в «Перечень научных изданий Республики Беларусь для опубликования результатов диссертационных исследований».

В 2015 г. журнал был включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ). Теперь вы имеете возможность с помощью инструментов и сервисов, доступных для вас на платформе eLIBRARY.RU (раздел «Личный кабинет») самостоятельно корректировать список своих публикаций и цитирований в РИНЦ, следить за анализом своей публикационной активности и т. д.

В этом году нами предприняты шаги по включению журнала в глобальный индекс цитирования Scopus, что расширит возможности представления исследований белорусских ученых для мировой научной общественности и повысит показатели цитируемости наших авторов. В связи с этим изменяются требования к оформлению статей, которые направляются для опубликования. С новыми «Правилами для авторов» вы можете ознакомиться либо в конце журнала, либо на сайте belnauka.by.

Надеемся на плодотворное сотрудничество!

МАТЭМАТЫКА

УДК 517.977

И. В. ГАЙШУН¹, В. В. ГОРЯЧКИН²

РОБАСТНАЯ И ИНТЕРВАЛЬНАЯ НАБЛЮДАЕМОСТЬ ДВУХПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ДИСКРЕТНЫХ СИСТЕМ С ИНТЕРВАЛЬНЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ

¹Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: gaishun@im.bas-net.by

²Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
e-mail: gorvv@bsu.by

Для некоторых классов интервальных дискретных двухпараметрических систем установлены условия робастной и интервальной наблюдаемости

Ключевые слова: двухпараметрическая дискретная система, интервальный анализ, робастная наблюдаемость, интервальная наблюдаемость.

I. V. GAISHUN¹, V. V. GORYACHKIN²

ROBUST AND INTERVAL OBSERVABILITY OF TWO-DIMENSIONAL DISCRETE SYSTEMS WITH INTERVAL COEFFICIENTS

¹Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus
e-mail: gaishun@im.bas-net.by

²Belarusian State University, Minsk, Belarus, e-mail: gorvv@bsu.by

For some classes of interval discrete two-dimensional systems conditions of robust and interval observability are established

Keywords: two-dimensional discrete system, interval analysis, robust observability, interval observability.

Введение. Во многих прикладных задачах коэффициенты исследуемых систем точно не известны, а заданы лишь интервалы, в которых они принимают значения. Это приводит к необходимости исследовать различные классы уравнений с интервальными коэффициентами. Изучать такие уравнения можно как в рамках интервального анализа [1, 2], рассматривая их как единый математический объект, так и исследовать все системы, получаемые при различных реализациях коэффициентов. В первом случае мы говорим об интервальных свойствах уравнений, во втором – о робастных свойствах.

Предлагаемая работа посвящена вопросам интервальной и робастной наблюдаемости двухпараметрических дискретных систем [3] с интервальными коэффициентами.

1. Элементы интервальной арифметики. Пусть \mathbf{IR} – множество замкнутых интервалов $[a] = [a_1, a_2]$ на вещественной прямой \mathbf{R} (равенство $a_1 = a_2$ не исключается; в этом случае интервал называется точечным и обозначается a). Пусть $*$ – одна из арифметических операций (сложение, вычитание, умножение, деление) во множестве вещественных чисел \mathbf{R} . Для любых $[a], [b] \in \mathbf{IR}$ положим

$$[a] * [b] = \{a * b : a \in [a], b \in [b]\}$$

(если $*$ – операция деления, то предполагается, что $0 \notin [b]$). Легко убедиться, что $[a] * [b] \in \mathbf{IR}$.

Определенные таким образом операции на \mathbf{IR} обладают следующими свойствами: сложение и умножение коммутативны и ассоциативны, а точечные интервалы $0 = [0, 0]$, $1 = [1, 1]$ – единственные их нейтральные элементы. Интервалы, не являющиеся точечными, не имеют обратного ни по сложению, ни по умножению, но $0 \in [a] - [a]$ и $1 \in [a] : [a]$ и $[a] + [b] = [c] + [b]$ влечет $[a] = [c]$. Закон дистрибутивности на \mathbf{IR} , вообще говоря, не выполняется, справедливо лишь свойство субдистрибутивности $[a]([b] + [c]) \subseteq [a][b] + [a][c]$. Если $bc \geq 0$, для всех $b \in [b]$, $c \in [c]$, то $[a]([b] + [c]) = [a][b] + [a][c]$.

Абсолютная величина $|[a]|$ интервала $[a] \in \mathbf{IR}$ определяется как число $\max\{|a_1|, |a_2|\}$. Очевидно, что $|[a] + [b]| \leq |[a]| + |[b]|$ и $|[a][b]| \leq |[a]||[b]|$.

Величины $\alpha([a]) = (a_1 + a_2) / 2$ и $\beta([a]) = (a_2 - a_1) / 2$ называются центром и радиусом интервала $[a]$. Элемент $[a] \in \mathbf{IR}$ неотрицателен, $[a] \geq 0$, (положителен $[a] > 0$), если $a_1 \geq 0$ ($a_1 > 0$).

Матрица $[A] = ([a_{i,j}])$ размера $m \times n$ над множеством \mathbf{IR} называется интервальной; если все $[a_{i,j}]$ – точечные интервалы, то $[A] = A$ – точечная матрица. Радиус, центр и абсолютная величина интервальной матрицы вычисляются поэлементно. Матрица $[A] = ([a_{i,j}])$ неотрицательна (положительна), если $[a_{i,j}] \geq 0$ ($[a_{i,j}] > 0$) для всех i, j . Сложение $m \times n$ и умножение $m \times q$ и $q \times n$ интервальных матриц определяется следующим образом:

$$[A] + [B] = ([a_{i,j}] + [b_{i,j}]), \quad [A][B] = \left(\sum_{k=1}^q [a_{i,k}][b_{k,j}] \right).$$

Умножение матриц не является, вообще говоря, ассоциативным. Однако если матрицы $[B]$ и $[C]$ симметричны, т. е. $[B] = -[B]$ и $[C] = -[C]$, то $[A]([B][C]) = ([A][B])[C]$.

2. Двухпараметрические системы наблюдения. Пусть A, D – $n \times n$ -матрицы над полем \mathbf{R} . Двухпараметрической дискретной системой [3] называется соотношение

$$x(t+1, s) = Ax(t, s) + Dx(t, s+1) \quad (1)$$

для определения неизвестной функции $x(t, s)$ ($t = 0, 1, 2, \dots$; $s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Очевидно, что для любой последовательности $\gamma(s)$ существует единственное решение $x(t, s)$, удовлетворяющее начальному условию $x(0, s) = \gamma(s)$. Далее в качестве начальных последовательностей будем рассматривать финитные функции, обращающиеся в нуль вне некоторого конечного множества [3].

Пусть к системе (1) присоединена выходная r – вектор-функция

$$y(t, s) = Cx(t, s). \quad (2)$$

Система (1) называется наблюдаемой по выходу (2), если по известной выходной последовательности $y(t, s)$ можно однозначно восстановить начальную финитную последовательность, породившую решение $x(t, s)$ (более строгое определение наблюдаемости можно найти в монографии [3]). Согласно [3, §11; 4], наблюдаемость имеет место тогда и только тогда, когда

$$\text{rank} \begin{pmatrix} C(A + mD)^i \\ i = \overline{0, n-1} \end{pmatrix} = n \quad (3)$$

хотя бы при одном $m \in \mathbf{R}$.

3. Наблюдаемость двухпараметрических дискретных систем с интервальными коэффициентами. Пусть $[A]$, $[D]$ и $[C]$ – интервальные $(n \times n)$ - и $(n \times r)$ -матрицы. Рассмотрим дискретную систему

$$[x(t+1, s)] = [A][x(t, s)] + [D][x(t, s+1)] \quad (4)$$

над множеством $(\mathbf{IR})^n$ с выходной функцией

$$[y(t, s)] = [C][x(t, s)]. \quad (5)$$

Ясно, что всякая интервальная финитная последовательность $[\gamma(s)]$ однозначно определяет решение $[x(t,s)]$, понимаемое в смысле интервальной арифметики.

Система (4) называется робастно наблюдаемой по выходу (5), если для любых $A \in [A]$, $D \in [D]$, $C \in [C]$ наблюдаема система (1) по выходу (2). Значит, робастная наблюдаемость имеет место тогда и только тогда, когда для любых $A \in [A]$, $D \in [D]$, $C \in [C]$ выполняется условие (3).

Рассмотрим вопрос об интервальной наблюдаемости. Если начальная финитная последовательность $[\gamma(s)]$ задана, то по уравнениям (4), (5) однозначно находится последовательность

$$[y(t,s)], \dots, [y(t,s+N+n-1)], [y(t+1,s)], \dots, [y(t+1,s+N+n-2)], \dots, [y(t+n-1,s+N)], \quad (6)$$

связанная с функциями

$$[x(t,s)], [x(t,s+1)], \dots, [x(t,s+N+n-1)] \quad (7)$$

некоторыми «линейными» соотношениями, которые не приводятся из-за их громоздкости. Здесь N – «длина» носителя [4] функции $[\gamma(s)]$; выбор числа n в данных последовательностях объясняется тем, что такое число элементов (6) достаточно для ответа на вопрос: является или нет робастно наблюдаемой система (4).

Определение. Система (4) интервально наблюдаема по выходу (5), если по последовательности (6) можно однозначно определить последовательность (7).

Использовать данное определение непосредственно не представляется возможным, поскольку связывающая последовательности (6), (7) система интервальных уравнений чрезвычайно сложна из-за особенностей интервальной арифметики, представленных в пункте 2. Поэтому далее мы ограничимся исследованием некоторых частных случаев системы (4), (5).

Отметим, что робастная и интервальная наблюдаемость – это разные свойства.

Пример. Пусть $n = 2$, $r = 1$,

$$[A] = \begin{pmatrix} 0 & [2, 4] \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, [D] = 0, [C] = (1, [1, 3]).$$

Тогда система (4), (5) интервально наблюдаема, но не является робастно наблюдаемой, так как при

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2,5 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in [A], C = (1; 2,5) \in [C]$$

условие (3) не выполняется.

4. Наблюдаемость систем с неотрицательными коэффициентами. Предположим, что матрицы $[A]$ и $[D]$, а также финитные начальные условия $[\gamma(s)]$ являются неотрицательными. Тогда, как легко убедиться, центр $\alpha_{t,s} = \alpha([x(t,s)])$ и радиус $\beta_{t,s} = \beta([x(t,s)])$ вектора $[x(t,s)]$ подчиняются точечной системе уравнений

$$\begin{pmatrix} \alpha_{t+1,s} \\ \beta_{t+1,s} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha([A]) & \beta([A]) \\ \beta([A]) & \alpha([A]) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{t,s} \\ \beta_{t,s} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \alpha([D]) & \beta([D]) \\ \beta([D]) & \alpha([D]) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{t,s+1} \\ \beta_{t,s+1} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

а выход $[y(t,s)]$ определяется равенством

$$\begin{pmatrix} \alpha([y(t,s)]) \\ \beta([y(t,s)]) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha([C]) & 0,5(|C_2| - |C_1|) \\ \beta([C]) & 0,5(|C_2| + |C_1|) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{t,s} \\ \beta_{t,s} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где C_1 и C_2 – точечные матрицы, составленные из левых и правых концов интервалов $[c_{i,j}]$, образующих матрицу $[C]$. Очевидно, что свойство интервальной наблюдаемости системы (4), (5) эквивалентно свойству наблюдаемости системы (8), (9) в классе финитных последовательностей. Поэтому из [3] следует

Теорема 1. Система (4), (5) с неотрицательными матрицами $[A]$, $[D]$ интервально наблюдаема в классе финитных начальных функций $[y(s)] \geq 0$, если

$$\text{rank} \begin{pmatrix} P(F_A + mF_D)^i \\ i = 0, 2n-1 \end{pmatrix} = 2n$$

хотя бы при одном $m \in \mathbf{R}$, где

$$P = \begin{pmatrix} \alpha([C]) & 0,5(|C_2| - |C_1|) \\ \beta([C]) & 0,5(|C_2| + |C_1|) \end{pmatrix}, F_A = \begin{pmatrix} \alpha([A]) & \beta([A]) \\ \beta([A]) & \alpha([A]) \end{pmatrix}, F_D = \begin{pmatrix} \alpha([D]) & \beta([D]) \\ \beta([D]) & \alpha([D]) \end{pmatrix}.$$

5. Наблюдаемость систем с симметричными матрицами $[A]$ и $[D]$. Предположим, что матрицы $[A]$ и $[D]$ симметричны, т. е. $[A] = -[A]$ и $[D] = -[D]$. Тогда, как легко убедиться, при $t > 0$ свойством симметричности обладают любое решение $[x(t,s)]$ и каждая выходная последовательность $[y(t,s)]$. Поэтому справедливы соотношения

$$[y(t,s)] = |[C]||x(t,s)]$$

$$[y(t+n-1, s+n)] = |[C]||[A] \quad [D] \dots \begin{pmatrix} [A] & [D] & & \\ & [A] & [D] & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & [A] & [D] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} [x(t, s+n)] \\ [x(t, s+n+1)] \\ \dots \\ [x(t, s+N+n-1)] \end{pmatrix},$$

из которых следует, что для точечной последовательности $\beta([y(t,s)])$ имеют место равенства

$$\beta([y(t,s)]) = |[C]||\beta([x(t,s)]),$$

$$\beta([y(t+n-1, s+N)]) = |[C]||[A] \quad [D] \dots \begin{pmatrix} [A] & [D] & & \\ & [A] & [D] & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & [A] & [D] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta([x(t, s+n)]) \\ \beta([x(t, s+n+1)]) \\ \dots \\ \beta([x(t, s+N+n-1)]) \end{pmatrix}.$$

Значит, справедлива

Теорема 2. Система (4), (5) с симметричными интервальными матрицами $[A]$ и $[D]$ интервально наблюдаема при $t > 0$, если

$$\text{rank} \begin{pmatrix} (|[C]|) ([A] + m[D])^i \\ i = 0, n-1 \end{pmatrix} = n$$

хотя бы при одном $m \in \mathbf{R}$.

Список использованной литературы

1. Алефельд, Г. Введение в интервальные вычисления / Г. Алефельд, Ю. Херцбергер; пер. с англ. Г. Е. Минца, А. Г. Яковлева; под ред. Ю. В. Матиясевича. – М.: Мир, 1987.
2. Шарый, С. А. Конечномерный интервальный анализ [Электронный ресурс] / С. А. Шарый. – Новосибирск: ИВТ СО РАН, 2013. – Режим доступа: <http://www.nsc.ru/interval/Libraly/Inte Books/Shary Book.pdf>. – Дата доступа: 10.02.2016.
3. Гайшун, И. В. Многопараметрические системы управления / И. В. Гайшун. – Минск: Навука і тэхніка, 1996.
4. Гайшун, И. В. Об управляемости и наблюдаемости двухпараметрических дискретных систем / И. В. Гайшун, В. В. Горячкин // Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1989. – № 4. – С. 3–8.

Поступила в редакцию 11.04.2016

УДК 517.968

Ф. В. ЧУМАКОВ¹, С. И. ВАСИЛЕЦ²

**ОБ ОДНОМ ИНТЕГРАЛЬНОМ УРАВНЕНИИ
ПЕРВОГО РОДА С ПОЛЯРНО-ЛОГАРИФМИЧЕСКИМ ЯДРОМ**

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
e-mail: fchumakov@tut.by

²Белорусский государственный педагогический университет им. Максима Танка,
Минск, Беларусь, e-mail: svasilets@tut.by

Интегральное уравнение первого рода с полярно-логарифмическим ядром с помощью предельных значений надлежащим образом выбранной регулярной ветви многозначной аналитической функции и формул Сохоцкого для интеграла Коши сводится к последовательному решению характеристического особого уравнения и обращению интеграла Коши. Решение выписывается в замкнутой форме.

Ключевые слова: интегральное уравнение, многозначная аналитическая функция, регулярная ветвь многозначной аналитической функции, формулы Сохоцкого, характеристическое особое интегральное уравнение, интеграл Коши.

F. V. CHUMAKOV¹, S. I. VASILETS²

FIRST-KIND INTEGRAL EQUATION WITH POLAR-LOGARITHMIC KERNEL

¹Belarusian State University, Minsk, Belarus, e-mail: fchumakov@tut.by

²Belarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank, Minsk, Belarus,
e-mail: svasilets@tut.by

The first-kind integral equation with polar-logarithmic kernel reduces to successive solution of the characteristic singular equation and to inversion of the Cauchy integral using limiting values of the appropriately selected regular branch of the multi-valued analytic function and the Sokhotskii formulas for the Cauchy integral. The solution is written in closed form.

Keywords: integral equation, many-valued analytic function, regular branch of multi-valued analytic function, Sokhotskii formulas, characteristic singular integral equation, Cauchy integral.

Дадим в замкнутой форме решение уравнения

$$a(x)\varphi(x) + b(x) \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau - x} + \frac{a(x)}{\pi^2} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x - \alpha)(\beta - \tau)}{(\beta - x)(\tau - \alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau - x} = f(x), \quad (1)$$

где $\alpha < x < \beta$, $\varphi(x)$ – искомое решение, $a(x)$, $b(x)$, $f(x)$ – заданные на отрезке $[\alpha, \beta]$ гельдеровские функции [1]. Для решения этого уравнения применим метод аналитического продолжения. Для этого введем вспомогательную аналитическую в комплексной плоскости функцию вида

$$\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(z - \alpha)(\beta - \tau)}{(z - \beta)(\tau - \alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau - z}, \quad (2)$$

которая является многозначной аналитической функцией. Выберем однозначную ветвь этой функции. Для этого сделаем разрез в плоскости, соединяющий точки ветвления, и зададим правило вычисления значений выбранной ветви по формуле $\ln z = \ln|z| + i \arg z$, где $-\pi < \arg z \leq \pi$.

Выбранная ветвь будет однозначной аналитической функцией в плоскости с указанным разрезом и будет обращаться в бесконечности в нуль порядка единицы. На верхнем $\Phi^+(x)$ и нижнем $\Phi^-(x)$ берегах разреза она будет принимать различные предельные значения. Найдем эти предельные значения, записав формулу (2) в виде суммы двух интегралов

$$\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(z-\alpha)(\beta-\tau)}{(z-\beta)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-z} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-z} + \frac{1}{2\pi i} \ln \left(\frac{z-\alpha}{z-\beta} \right) \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-z}.$$

Далее имеем

$$\begin{aligned} \Phi^+(x) &= \frac{1}{2} \varphi(x) \ln \left(\frac{\beta-x}{x-\alpha} \right) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \left(\ln \frac{x-\alpha}{\beta-x} - \pi i \right) \left(\frac{1}{2} \varphi(x) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \varphi(x) \ln \left(\frac{\beta-x}{x-\alpha} \right) + \frac{1}{2} \varphi(x) \ln \frac{x-\alpha}{\beta-x} - \frac{\pi i}{2} \varphi(x) - \frac{1}{2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x-\alpha)(\beta-\tau)}{(\beta-x)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \Phi^+(x) = -\frac{\pi i}{2} \varphi(x) - \frac{1}{2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x-\alpha)(\beta-\tau)}{(\beta-x)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x}. \end{aligned}$$

Аналогично находим

$$\begin{aligned} \Phi^-(x) &= -\frac{1}{2} \varphi(x) \ln \left(\frac{\beta-x}{x-\alpha} \right) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \left(\ln \frac{x-\alpha}{\beta-x} + \pi i \right) \times \\ &\times \left(-\frac{1}{2} \varphi(x) + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} \right) = -\frac{\pi i}{2} \varphi(x) + \frac{1}{2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \\ &+ \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x-\alpha)(\beta-\tau)}{(\beta-x)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \Phi^-(x) = -\frac{\pi i}{2} \varphi(x) + \frac{1}{2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x-\alpha)(\beta-\tau)}{(\beta-x)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x}. \end{aligned}$$

Здесь мы учли, что на верхнем берегу разреза предельное значение функции $\ln \left(\frac{z-\alpha}{z-\beta} \right)$ равно $\ln \frac{x-\alpha}{(\beta-x)e^{\pi i}} = -\pi i + \ln \frac{x-\alpha}{\beta-x}$, а на нижнем разрезе $-\ln \frac{(x-\alpha)e^{2\pi i}}{(\beta-x)e^{\pi i}} = \pi i + \ln \frac{x-\alpha}{\beta-x}$. Находим разность и сумму предельных значений функции $\Phi(z)$:

$$\Phi^+(x) - \Phi^-(x) = - \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x}, \quad (3)$$

$$\Phi^+(x) + \Phi^-(x) = -\pi i \varphi(x) + \frac{1}{\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x-\alpha)(\beta-\tau)}{(\beta-x)(\tau-\alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x}. \quad (4)$$

Заметим, что введенная функция $\Phi(z)$ обладает свойствами интеграла типа Коши, что дает нам основание представить ее в виде некоторого интеграла типа Коши $\Phi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\Psi(\tau)}{\tau-z} d\tau$. По формулам Сохоцкого находим разность и сумму предельных значений введенного интеграла типа Коши

$$\Phi^+(x) - \Phi^-(x) = \psi(x), \quad (5)$$

$$\Phi^+(x) + \Phi^-(x) = \frac{1}{\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\Psi(\tau)}{\tau - x} d\tau. \quad (6)$$

Сравнивая сначала формулы (3) и (5), а затем формулы (4) и (6), придем к равенствам

$$\psi(x) = - \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau - x}, \quad (7)$$

$$\frac{1}{\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\Psi(\tau) d\tau}{\tau - x} = -\pi i \varphi(x) + \frac{1}{\pi i} \int_{\alpha}^{\beta} \ln \left(\frac{(x - \alpha)(\beta - \tau)}{(\beta - x)(\tau - \alpha)} \right) \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau - x}. \quad (8)$$

Подставляя в уравнение (1) значения интегралов из формул (7), (8), придем к характеристическому особому уравнению вида

$$b(x)\psi(x) - \frac{a(x)}{\pi^2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\Psi(\tau)}{\tau - x} d\tau = -f(x), \quad (9)$$

решение которого приведено в монографии [2, § 47]. Мы воспользуемся здесь решением, которое приведено в [3, § 30]. Решение $\varphi(x)$ исходного уравнения (1) найдем путем обращения особого интеграла (7) после того, как будет определено решение $\psi(x)$ уравнения (9). Заметим, что уравнение (7) является частным случаем уравнения (9).

Итак, сначала найдем решение характеристического особого уравнения (9). Обозначим

$$G(x) = \frac{\pi b(x) + a(x)i}{\pi b(x) - a(x)i}. \text{ Так как модуль этой функции } |G(x)| = \left| \frac{\pi b(x) + a(x)i}{\pi b(x) - a(x)i} \right| = 1, \text{ то можно запи-}$$

сать $G(x) = e^{\theta(x)i}$, где $\theta(x) = \arg G(x)$. Выберем аргумент так, чтобы выполнялось неравенство

$$0 \leq \theta(x) < 2\pi. \text{ Число } \chi = \text{ind} \frac{\pi b(x) + a(x)i}{\pi b(x) - a(x)i} \text{ называется индексом уравнения (9). Далее заметим, что}$$

разрешимость особого уравнения (9), количество его решений и их вид зависят от индекса χ . Величина же индекса зависит от того, в каком классе ищутся решения уравнения. Будем предполагать, что имеет место нормальный случай уравнения (9), т. е. коэффициенты уравнения $a(x), b(x)$ одновременно не обращаются ни в нуль, ни в бесконечность на отрезке интегрирования. Другими словами, $(\pi b(x) + a(x)i)(\pi b(x) - a(x)i) = \pi^2 b^2(x) + a^2(x) = A(x) \neq 0$.

Решение уравнения (9) будем искать в одном из классов функций: $H([\alpha, \beta])$ – функции, удовлетворяющие условию Гельдера на $[\alpha, \beta]$; $H^*([\alpha, \beta])$ – гельдеровские функции с интегрируемыми особенностями на концах; $H_{\alpha}^*([\alpha, \beta])$ – гельдеровские функции, ограниченные в α и неограниченные в β ; $H_{\beta}^*([\alpha, \beta])$ – гельдеровские функции, ограниченные в β и неограниченные в α . Обозначим через X одно из вышеназванных пространств. Индекс уравнения (9) в пространстве X вычисляется по формуле $\chi = \left[\frac{\theta(\beta)}{2\pi} \right] + n_{\alpha} + n_{\beta} - 1$, где числа n_{α}, n_{β} вычисляются по следующему правилу:

$$\chi = \left[\frac{\theta(\beta)}{2\pi} \right] + n_{\alpha} + n_{\beta} - 1, \text{ где числа } n_{\alpha}, n_{\beta} \text{ вычисляются по следующему правилу:}$$

$n_{\alpha} = 0$, если ищется ограниченное решение при $x \rightarrow \alpha$, и $n_{\alpha} = 1$, если ищется неограниченное решение при $x \rightarrow \alpha$. Аналогично определяется n_{β} . Другими словами, индекс χ равен

$$\chi = \left[\frac{\theta(\beta)}{2\pi} \right] + \begin{cases} 1 & \text{в случае класса } H^*(\alpha, \beta), \\ 0 & \text{в случае класса } H_{\alpha}^* \text{ или } H_{\beta}^*, \\ -1 & \text{в случае класса } H. \end{cases} \quad (10)$$

Далее приведем формулы

$$\mu_\alpha = 1 - n_\alpha - \frac{\theta(\alpha)}{2\pi}, \mu_\beta = \frac{\theta(\beta)}{2\pi} - \left[\frac{\theta(\beta)}{2\pi} \right] - n_\beta, \quad -1 < \mu_\alpha \mu_\beta < 1. \quad (11)$$

Если выполняются условия $\chi \geq 0$ в пространстве X , то уравнение (9) безусловно разрешимо в X и его общее решение дается формулой

$$\begin{aligned} \psi(x) = & \frac{a(x)}{A(x)} Z_0(x) (x-\alpha)^{\mu_\alpha} (\beta-x)^{\mu_\beta} P_{\chi-1}(x) - \pi^2 \frac{b(x)}{A(x)} f(x) - \\ & - \frac{a(x)}{A(x)} Z_0(x) \int_\alpha^\beta \left(\frac{x-\alpha}{t-\alpha} \right)^{\mu_\alpha} \left(\frac{\beta-x}{\beta-t} \right)^{\mu_\beta} \frac{f(t)}{Z_0(t)(t-x)} dt, \end{aligned} \quad (12)$$

где $P_{\chi-1}(x)$ – многочлен степени $\chi-1$ с произвольными коэффициентами, причем $P_{\chi-1}(x) \equiv 0$ при $\chi=0$,

$$Z_0(x) = \exp \frac{1}{2\pi} \left[\int_\alpha^\beta \frac{\theta(t) dt}{t-x} + \theta(\alpha) \ln(x-\alpha) - \theta(\beta) \ln(\beta-x) \right] \quad (13)$$

является гельдеровской функцией и нигде не обращается в нуль. Для сокращения записи формулу (12) будем записывать в виде

$$\psi(x) = Rf(x) + \sum_{k=1}^{\chi} c_k \psi_k(x), \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} Rf(x) = & -\frac{\pi^2 b(x)}{A(x)} f(x) - \frac{a(x)}{A(x)} Z_0(x) \int_\alpha^\beta \left(\frac{x-\alpha}{t-\alpha} \right)^{\mu_\alpha} \left(\frac{\beta-x}{\beta-t} \right)^{\mu_\beta} \frac{f(t)}{Z_0(t)(t-x)} dt, \\ \psi_k(x) = & \frac{a(x)}{A(x)} Z_0(x) (x-\alpha)^{\mu_\alpha} (\beta-x)^{\mu_\beta} x^{k-1}. \end{aligned}$$

Если же $\chi < 0$, то для разрешимости уравнения (9) необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$\int_\alpha^\beta \frac{(x-\alpha)^{k-1} f(x) dx}{Z_0(x)(x-\alpha)^{\mu_\alpha} (\beta-x)^{\mu_\beta}} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, |\chi|. \quad (15)$$

При выполнении этих условий уравнение (9) имеет единственное решение в пространстве X , причем в формуле (12) следует считать $P_{\chi-1}(x) \equiv 0$. Далее, для получения решения уравнения (1) надо обратить интеграл

$$\frac{1}{\pi} \int_\alpha^\beta \frac{\varphi(\tau) d\tau}{\tau-x} = -\frac{1}{\pi} \psi(x) = -\frac{1}{\pi} Rf(x) - \frac{1}{\pi} \sum_{k=1}^{\chi} c_k \psi_k(x), \quad (16)$$

применяя формулы обращения уравнения (16), приведенные в монографии [2, § 42]. Индекс χ уравнения (9) в пространстве X будем называть также индексом исходного уравнения (1). Для получения решения $\varphi(x)$ уравнения (1) в классе X необходимо при обращении интеграла типа Коши (16)

рассматривать решения $\psi(x)$ уравнения (9) только в классе ограниченных функций, так как в противном случае могут появляться при обращении интеграла (16) функции, обращающиеся на концах отрезка в бесконечность порядка не меньшего единицы. Итак, пусть решение уравнения (9) в классе ограниченных функций дается формулой (14) при $\chi \geq 0$. Решение уравнения (16) будем искать в одном из классов X .

1. Решение уравнения (1) в классе функций, ограниченных на обоих концах отрезка (класс $H([\alpha, \beta])$). Интеграл (16) рассматриваем как особое характеристическое уравнение, решение которого $\varphi(x)$ ищем в классе ограниченных функций. Индекс уравнения (16) в классе ограниченных функций, определяемый по формуле (10), равен $\chi_1 = -1$, так как $n_\alpha = n_\beta = 0$, $\mu_\alpha = \mu_\beta = \frac{1}{2}$.

Уравнение (16) в этом случае разрешимо лишь при выполнении условия

$$\begin{aligned} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi(\tau)}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x} = 0 &\Leftrightarrow \int_{\alpha}^{\beta} \frac{Rf(\tau)d\tau}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} + \sum_{k=1}^{\chi} c_k \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi_k(\tau)d\tau}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} = 0 \Leftrightarrow \\ &\Leftrightarrow \int_{\alpha}^{\beta} \frac{Rf(\tau)d\tau}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} = 0, \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi_k(\tau)d\tau}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} = 0, \quad k=1,2,\dots,\chi. \end{aligned} \quad (17)$$

При выполнении условий (17) решение $\varphi(x)$ уравнения (16), а значит, и уравнения (1) в классе $H([\alpha, \beta])$, дается формулой

$$\varphi(x) = \varphi_0(x) + \sum_{k=1}^{\chi} c_k \varphi_k(x), \quad (18)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= \frac{1}{\pi^2} \sqrt{(x-\alpha)(\beta-x)} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{Rf(\tau)}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x}, \\ \varphi_k(x) &= \frac{1}{\pi^2} \sqrt{(x-\alpha)(\beta-x)} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\psi_k(\tau)}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x}, \quad k=1,2,\dots,\chi. \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь $\varphi_0(x)$ – решение неоднородного уравнения (1), а $\varphi_k(x)$ ($k=1,2,\dots,\chi$) – система линейно независимых решений однородного уравнения (1). Если же $\chi = 0$, то решение дается формулой (19). В случае $\chi < 0$ при выполнении условий (15), а также условия

$$\int_{\alpha}^{\beta} \frac{Rf(\tau)d\tau}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} = 0, \quad (20)$$

решение уравнения (1) дается формулой (19).

2. Решение уравнения (1) в классе функций $H_{\alpha}^*([\alpha, \beta])$. В этом случае индекс уравнения (16) $\chi_1 = 0$, так как $n_\alpha = 0$, $n_\beta = 1$, $\theta(x) = \pi$. Имеем $\mu_\alpha = \frac{1}{2}$, $\mu_\beta = -\frac{1}{2}$. Решение уравнения (16), а следовательно, и уравнения (1), при $\chi > 0$ дается формулой (18), где

$$\begin{aligned} \varphi_0(x) &= \frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{x-\alpha}{\beta-x}} \int_{\alpha}^{\beta} \sqrt{\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha}} \frac{Rf(\tau)}{\tau-x} d\tau, \\ \varphi_k(x) &= \frac{1}{\pi^2} \sqrt{\frac{x-\alpha}{\beta-x}} \int_{\alpha}^{\beta} \sqrt{\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha}} \frac{\psi_k(\tau)}{\tau-x} d\tau, \quad k=1,2,\dots,\chi. \end{aligned} \quad (21)$$

При $\chi = 0$ решение уравнения (1) дается формулой (21). Если же $\chi < 0$, то уравнение (1) при выполнении условий (15) и условия $\int_{\alpha}^{\beta} \sqrt{\frac{\beta-\tau}{\tau-\alpha}} Rf(\tau) d\tau = 0$ имеет единственное решение (21).

3. Решение уравнения (1) в классе функций $H^*(\alpha, \beta)$. В этом случае индекс уравнения (16) $\chi_1 = 1$, так как $n_{\alpha} = 0, n_{\beta} = 1, \theta(x) = \pi$. Имеем $\mu_{\alpha} = -\frac{1}{2}, \mu_{\beta} = -\frac{1}{2}$. Решение уравнения (16), а следовательно, и уравнения (1), при $\chi > 0$ дается формулой (18), где

$$\varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{(x-\alpha)(\beta-x)}} \left(c_0 + \frac{1}{\pi^2} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{Rf(\tau)}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x} \right), \quad (22)$$

$$\varphi_k(x) = \frac{1}{\pi^2 \sqrt{(x-\alpha)(\beta-x)}} \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\Psi_k(\tau)}{\sqrt{(\tau-\alpha)(\beta-\tau)}} \frac{d\tau}{\tau-x}.$$

При $\chi = 0$ решение уравнения (1) дается формулой (22). Если же $\chi < 0$, то уравнение (1) при выполнении условий (15) имеет единственное решение, которое дается формулой (22).

Список использованной литературы

1. Чумаков, Ф. В. Интегральные уравнения с логарифмическим ядром / Ф. В. Чумаков // Дифференц. уравнения. – 1968. – Т. 4, № 2. – С. 336–346.
2. Гахов, Ф. Д. Краевые задачи / Ф. Д. Гахов. – М.: Наука, 1977.
3. Самко, С. Г. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения / С. Г. Самко, А. А. Килбас, О. И. Маричев. – Минск: Наука и техника, 1987.

Поступила в редакцию 15.04.2016

УДК 519.216+517.518.8

Л. А. ЯНОВИЧ¹, И. Н. ГУЛО²

**ВЫЧИСЛЕНИЕ МОМЕНТОВ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ, ЗАДАВАЕМЫХ
ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИМИ ФУНКЦИЯМИ ОТ БРОУНОВСКОГО ДВИЖЕНИЯ**

¹*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: yanovich@im.bas-net.by*

²*Белорусский государственный педагогический университет им. Максима Танка, Минск, Беларусь,
e-mail: gulo_irina@mail.ru*

Для случайных процессов, задаваемых как функционал от квадратичного многочлена броуновского движения, были предложены некоторые аппроксимации. Проведен вычислительный эксперимент для нахождения погрешностей математических ожиданий для случая тригонометрических функций.

Ключевые слова: квадратурные формулы, случайные процессы, стандартный винеровский процесс, математическое ожидание, моменты случайных процессов.

L. A. YANOVICH¹, I. N. GULO²

**CALCULATION OF MOMENTS OF STOCHASTIC PROCESSES DEFINED
BY TRIGONOMETRIC FUNCTIONS OF BROWNIAN MOTION**

¹*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: yanovich@im.bas-net.by*

²*Belarusian State Pedagogical University named after Maxim Tank, Minsk, Belarus,
e-mail: gulo_irina@mail.ru*

Some approximations for stochastic processes defined as a functional of quadratic polynomials of Brownian motion were proposed. For finding errors of the mathematical expectations in the case of trigonometric functions, computational experiment was conducted.

Keywords: quadrature formulas, stochastic processes, standard Wiener process, mathematical expectation, moments of random processes.

Введение. Вычисление средних значений и других вероятностных характеристик случайных процессов, определяемых посредством функций от некоторых заданных процессов, относится к широко распространенной задаче. В большинстве случаев это сводится к вычислению интегралов, общий вид которых определяется вероятностными характеристиками исходного случайного процесса. Точное вычисление таких интегралов обычно возможно для незначительного числа специальных видов подынтегральных функций, поэтому основными способами приближенного вычисления вероятностных характеристик такого класса процессов являются квадратурные формулы.

Ранее в статье [1] были предложены некоторые способы приближения случайных процессов вида $\xi(t) = F(W(t))$, где $W(t)$ – стандартный винеровский процесс, а также рассмотрены квадратурные формулы для вычисления центральных моментов таких процессов. Данная работа является продолжением [1]. В ней рассмотрены аналогичные задачи для процессов вида

$$\xi(t) = F(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma), \quad (1)$$

где $F(x)$ – заданная непрерывная на R функция, $W(t)$ – также стандартный винеровский процесс, т. е. гауссовский случайный процесс с нулевым средним значением и корреляционной функцией $B(t, s) = \min(t, s)$ ($t, s \in [0; 1]$); α, β, γ – действительные числа или независимые случайные величины.

© Янович Л. А., Гуло И. Н., 2016

1. Квадратурные формулы для вычисления математического ожидания. Воспользуемся известной формулой (см. напр., [2]) для вычисления k -х моментов случайного процесса (1):

$$m_k(t) = E\{\xi^k(t)\} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} F^k(2\alpha tx^2 + \beta\sqrt{2t}x + \gamma) dx, \quad (2)$$

($k = 0, 1, 2, \dots$), функция $F(x)$ и параметры α, β, γ таковы, что интеграл (2) сходится.

Для приближенного вычисления интеграла (2), как и в [1], воспользуемся квадратурной формулой [3] наивысшей алгебраической степени точности для интегралов по числовой оси с весовой функцией $p(x) = e^{-x^2}$:

$$m_k(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{v=1}^n A_v F^k(2\alpha tx_v^2 + \beta\sqrt{2t}x_v + \gamma) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} r_n(F^k), \quad (3)$$

где x_v – корни многочлена Эрмита n -й степени $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$, A_v – коэффициенты квадратурной формулы, а $r_n(F^k)$ – ее остаточный член. Коэффициенты A_v могут задаваться аналитически разными способами. Мы будем использовать следующее представление для A_v :

$$A_v = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} l_{nv}(x) dx,$$

$$\text{где } l_{nv}(x) = \frac{(x - x_1) \cdots (x - x_{v-1})(x - x_{v+1}) \cdots (x - x_n)}{(x_v - x_1) \cdots (x_v - x_{v-1})(x_v - x_{v+1}) \cdots (x_v - x_n)}.$$

Обозначим квадратурную сумму в формуле (3) через

$$S_{nk}(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{v=1}^n A_v F^k(2\alpha tx_v^2 + \beta\sqrt{2t}x_v + \gamma). \quad (4)$$

Так как рассматриваемая квадратурная формула точна для алгебраических многочленов степени $2n - 1$, то для широкого класса функций $F^k(x)$ последовательность $S_{nk}(t)$ при $n \rightarrow \infty$ будет (см. также [3]) сходиться к моменту $m_k(t)$.

Рассмотрим далее последовательность случайных процессов

$$\xi_{nk}(t) = \sum_{v=1}^n l_{nv} \left(\frac{W(t)}{\sqrt{2t}} \right) F^k(2\alpha x_v^2 + \sqrt{2t}\beta x_v + \gamma) \quad (n, k = 1, 2, \dots). \quad (5)$$

Для вычисления математического ожидания случайного процесса $\eta(t)$ вида $\eta(t) = f(W(t))$ воспользуемся [2] формулой

$$E\{\eta(t)\} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(\sqrt{2t}x) dx, \quad (6)$$

где $y = f(x)$ – функция, для которой несобственный интеграл в правой части (6) сходится.

На основании этой формулы, а также с учетом формул (2) и (3), можно показать, что справедливо равенство $E\{\xi_{nk}(t)\} = S_{nk}(t)$, где $S_{nk}(t)$ – квадратурная сумма (4). И таким образом среднее значение последовательности случайных процессов (5) будет при $n \rightarrow \infty$ сходиться к среднему значению исходного процесса (1) для тех функций $F(x)$, для которых имеет место сходимость соответствующего квадратурного процесса.

Рассмотрим примеры случайных процессов вида (1) и для моментов первого порядка приведем результаты вычислительного эксперимента.

Для случайного процесса

$$\xi(t) = \theta \cos(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma), \quad (7)$$

где θ – произвольная фиксированная константа, используя (2) и формулу для вычисления такого вида интегралов (см. [4 с. 499, формула 3.923.2]), можем вычислить момент первого порядка (математическое ожидание):

$$m_c(t) = E\{\xi(t)\} = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \cos(2\alpha tx^2 + \beta\sqrt{2t}x + \gamma) dx =$$

$$= \frac{\theta}{\sqrt[4]{1+4\alpha^2 t^2}} \exp\left\{-\frac{\beta^2 t}{2(1+4\alpha^2 t^2)}\right\} \cos\left\{\frac{1}{2} \operatorname{arctg}(2\alpha t) + \frac{(4\alpha^2 \gamma - \alpha\beta^2)t^2 + \gamma}{1+4\alpha^2 t^2}\right\}, \quad t \in [0;1].$$

И, соответственно, приближенный процесс $\xi_{nc}(t)$ для (7), в силу формулы (5), примет следующий вид:

$$\xi_{nc}(t) = \theta \sum_{v=1}^n l_{nv} \left(\frac{W(t)}{\sqrt{2t}} \right) \cos(2\alpha t x_v^2 + \beta\sqrt{2t}x_v + \gamma),$$

а квадратурная сумма (4) $S_{nc}(t)$ будет задаваться, соответственно, формулой

$$S_{nc}(t) = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \sum_{v=1}^n A_v \cos(2\alpha t x_v^2 + \beta\sqrt{2t}x_v + \gamma),$$

которая является приближением к точному математическому значению $m_c(t)$.

При $n = 9$ численные значения узлов x_v и коэффициентов A_v в формуле (4) таковы [3]:

$x_9 = -x_1 = 3,190993202$	$A_9 = A_1 = 0,0000396069774$
$x_8 = -x_2 = 2,266580585$	$A_8 = A_2 = 0,0049436242800$
$x_7 = -x_3 = 1,468553289$	$A_7 = A_3 = 0,0884745274000$
$x_6 = -x_4 = 0,723551019$	$A_6 = A_4 = 0,4326515590000$
$x_5 = 0$	$A_5 = 0,7202352160000$

Пример 1. Для случайного процесса (7) значение погрешности $r_{nc}(t) = m_c(t) - S_{nc}(t)$ вычисления математического ожидания $m_c(t)$ в точках $t_i = \frac{i}{5}$ ($i = 0, 1, \dots, 5$) для $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 1$ и $n = 9$ приведено в табл. 1.

Таблица 1

t_i	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1
$S_{nc}(t_i)$	0,54043931	0,35652498	0,25443564	0,20050560	0,1536785	0,07416710
$m_c(t_i)$	0,54030231	0,356435971	0,254201549	0,195744407	0,1574841	0,13041004
$r_{nc}(t_i)$	-0,00013701	-8,90121·10 ⁻⁵	-0,00023409	-0,0047612	0,0038057	0,05624294

Для случайного процесса

$$\zeta(t) = \theta \sin(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma), \quad (8)$$

используя формулу (см. [4. с. 499, формула 3.923.1]), аналогично можно вычислить точное значение момента первого порядка:

$$m_s(t) = E\{F(W(t))\} = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \sin(2\alpha x^2 + \beta\sqrt{2}tx + \gamma) dx =$$

$$= \frac{\theta}{\sqrt[4]{1+4\alpha^2 t^2}} \exp\left\{-\frac{\beta^2 t}{2(1+4\alpha^2 t^2)}\right\} \sin\left\{\frac{1}{2} \operatorname{arctg}(2\alpha t) + \frac{(4\alpha^2 \gamma - \alpha\beta^2)t^2 + \gamma}{1+4\alpha^2 t^2}\right\}.$$

И, соответственно, приближение $\xi_{ns}(t)$ для процесса (8) будет

$$\xi_{ns}(t) = \theta \sum_{v=1}^n l_{nv} \left(\frac{W(t)}{\sqrt{2t}} \right) \sin(2\alpha t x_v^2 + \beta\sqrt{2}t x_v + \gamma),$$

а $S_{ns}(t)$ будет задаваться формулой

$$S_{ns}(t) = \frac{\theta}{\sqrt{\pi}} \sum_{v=1}^n A_v \sin(2\alpha t x_v^2 + \beta\sqrt{2}t x_v + \gamma).$$

Ниже приведем аналогичные численные результаты, используя также квадратурную формулу с девятью узлами.

Пример 2. Для случайного процесса (8) значение погрешности $r_{ns}(t) = m_s(t) - S_{ns}(t)$ вычисления момента первого порядка $m_s(t)$ в точках $t_i = \frac{i}{5}$ ($i = 0; 1; \dots; 5$) для $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 1$ и $n = 9$ приведено в табл. 2.

Таблица 2

t_i	0	0,2	0,4	0,6	0,8	1
$S_{ns}(t_i)$	0,8416844	0,80914724	0,73963709	0,68245020	0,65538644	0,61321391
$m_s(t_i)$	0,84147099	0,80894253	0,73975828	0,67993219	0,63129265	0,59088133
$r_{ns}(t_i)$	-0,00021338	-0,00020471	0,00012119	-0,00251801	-0,02409379	-0,02233258

2. О других процессах, аппроксимирующих случайные процессы вида (1). Рассмотрим последовательности процессов $\xi_n(t)$ ($n = 1, 2, \dots$) следующих двух видов:

$$\xi_n(t) = \sum_{k=0}^n \sum_{v=0}^{n-k} c_{kv} W^{2k+2v}(t) f\left(\frac{k}{n}\right), \quad (9)$$

и

$$\xi_n(t) = \sum_{k=0}^n C_n^k \frac{(1-t)^{n-k}}{(2k-1)!!} W^{2k}(t) f\left(\frac{k}{n}\right), \quad (10)$$

где $c_{kv} = (-1)^v \frac{n!}{k!v!(n-k-v)!(2k+2v-1)!!}$, $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$, $f(t)$ – любая непрерывная на $[0; 1]$ функция. Нетрудно убедиться, что математические ожидания $E\{\xi_n(t)\}$ этих процессов совпадают с многочленом Бернштейна n -й степени $B_n(f; t) = \sum_{k=0}^n C_n^k t^k (1-t)^{n-k} f\left(\frac{k}{n}\right)$ для функции $f(t)$, $t \in [0; 1]$.

Если $f(t) = m_c(t)$ или $f(t) = m_s(t)$, то значения математических ожиданий этих процессов будут задаваться соответственно формулами

$$E\{\xi_n(t)\} = \sum_{k=0}^n C_n^k t^k (1-t)^{n-k} m_c\left(\frac{k}{n}\right),$$

$$E\{\xi_n(t)\} = \sum_{k=0}^n C_n^k t^k (1-t)^{n-k} m_s\left(\frac{k}{n}\right),$$

и, следовательно, средние значения процессов (9) и (10) при $n \rightarrow \infty$ будут стремиться к средним значениям процессов (7) и (8).

П р и м е р 3. Значения математических ожиданий $m_c(t)$ и $m_s(t)$ случайных процессов, рассмотренных в примерах 1 и 2, могут быть также вычислены приближенно с помощью многочленов Бернштейна. Численные значения погрешности $r_{nc}(t) = m_c(t) - B_n(m_c; t)$, где $B_n(m_c; t) = E\{\xi_{nc}(t)\}$ в точках $t_i = \frac{i}{5}$, ($i=1,2,3,4$) для $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 1$ и $n = 20$ для случайного процесса $\xi(t) = \theta \cos(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma)$ приведены в табл. 3, а для случайного процесса $\zeta(t) = \theta \sin(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma)$ значения погрешности $r_{ns}(t) = m_s(t) - B_n(m_s; t)$, где $B_n(m_s; t) = E\{\xi_{ns}(t)\}$, – в табл. 4.

Таблица 3

t_i	0,2	0,4	0,6	0,8
$B_n(m_c; t_i)$	0,364790426	0,260616407	0,198791924	0,15861822
$m_c(t_i)$	0,356435971	0,254201549	0,195744407	0,1574841
$r_{nc}(t_i)$	-0,008354455	-0,006414858	-0,003047517	-0,00113412

Таблица 4

t_i	0,2	0,4	0,6	0,8
$B_n(m_s; t_i)$	0,806119176	0,741247032	0,681612519	0,632124146
$m_s(t_i)$	0,808942529	0,739758284	0,679932185	0,631292646
$r_{ns}(t_i)$	0,002823353	-0,001488748	-0,001680333	-0,000831501

Точность формул, полученных с помощью многочленов Бернштейна, согласуется с теоретическим результатом о невысокой точности положительных линейных операторов.

Приближенные формулы для процессов вида (1) могут быть построены и на основе других линейных положительных операторов [5, 6], определенных на пространстве $C(T)$ – непрерывных на отрезке T функций. Например, можно рассмотреть оператор Г. М. Миракьяна

$$M_n(f; t) = e^{-nt} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n^k t^k}{k!} f\left(\frac{k}{n}\right), \quad (11)$$

где $f(t) \in C(T)$. Как известно, при $n \rightarrow \infty$ он равномерно сходится на конечном отрезке $T = [0; a]$ ($a > 0$) к непрерывной на этом отрезке функции $f(t)$.

В частности, для случайных процессов (7) и (8) аппроксимирующими процессами будут

$$\tilde{\xi}_n(t) = e^{-nt} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{n^k}{k!} \frac{W^{2k}(t)}{(2k-1)!!} f\left(\frac{k}{n}\right), \quad (12)$$

где $f(t) = m_c(t)$ и $f(t) = m_s(t)$, $0 \leq t \leq 1$.

Если сумму ряда в операторе Г. М. Миракьяна (11) заменить на N -ю частичную сумму

$M_N(f; t) = e^{-Nt} \sum_{k=0}^N \frac{N^k t^k}{k!} f\left(\frac{k}{N}\right)$, а сумму ряда в правой части (12) на соответствующую частичную сумму $\tilde{\xi}_N(t) = e^{-Nt} \sum_{k=0}^N \frac{N^k}{k!} \frac{W^{2k}(t)}{(2k-1)!!} f\left(\frac{k}{N}\right)$, то для случайного процесса $\xi(t) = \theta \cos(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma)$

верно $M_N(m_c; t) \approx E\{\tilde{\xi}_{Nc}(t)\}$. При $N = 50$ получены численные значения погрешности $r_{Nc}(t) = m_c(t) - M_N(m_c; t)$ в точках $t_i = \frac{i}{5}$, ($i = 1, 2, 3, 4$) для $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 1$, которые приведены в табл. 5.

Таблица 5

t_i	0,2	0,4	0,6	0,8
$M_N(m_c; t_i)$	0,360715921	0,258361488	0,198650001	0,153222897
$m_c(t_i)$	0,356435971	0,254201549	0,195744407	0,1574841
$r_{Nc}(t_i)$	-0,00427995	-0,004159939	-0,002905594	0,004261203

Аналогично, для случайного процесса $\zeta(t) = \theta \sin(\alpha W^2(t) + \beta W(t) + \gamma)$ значения погрешности $r_{Ns}(t) = m_s(t) - M_N(m_s; t)$ приближения математического ожидания $m_s(t)$ N -й частичной суммой $M_N(m_s; t) \approx E\{\tilde{\xi}_{Ns}(t)\}$ оператора Г. М. Миракьяна (11), в тех же точках $t_i = \frac{i}{5}$, ($i = 1, 2, 3, 4$) и при тех же значениях параметров $\alpha = \beta = \gamma = \theta = 1$, приведены в табл. 6.

Таблица 6

t_i	0,2	0,4	0,6	0,8
$M_N(m_s; t_i)$	0,807594304	0,74085296	0,681421411	0,602473111
$m_s(t_i)$	0,808942529	0,739758284	0,679932185	0,631292646
$r_{Ns}(t_i)$	0,001348225	-0,00109468	-0,001489226	0,028819535

Заключение. В данной статье для случайных процессов вида (1) построены последовательности приближений (5), средние значения которых при $n \rightarrow \infty$ сходятся к среднему значению исходных процессов (1). Аналогичные приближения построены и для процессов гармонического типа видов (7) и (8), для которых проведен вычислительный эксперимент при определенных численных значениях параметров, входящих в эти процессы.

Аналогичные результаты могут быть получены для дисперсии и других вероятностных характеристик, рассматриваемых в данной работе случайных процессов, при незначительных изменениях в описанных здесь методах приближения.

Работа выполнена в рамках проекта Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (№ Ф14Д-002).

Список использованной литературы

1. Янович, Л. А. О приближенном вычислении функций от процесса броуновского движения / Л. А. Янович, И. Н. Гуло // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2014. – № 1. – С. 5–10.
2. Янович, Л. А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам / Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника, 1976.
3. Крылов, В. И. Приближенное вычисление интегралов / В. И. Крылов. – М.: Наука, 1967.
4. Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – М.: Физматгиз, 1963.
5. Коровкин, П. П. Линейные операторы и теория приближения / П. П. Коровкин. – М.: Физматлит, 1959. (*Korovkin, P. P. Linear operators and approximation theory / P. P. Korovkin. – Delhi: Hindustan Publ. Corp., 1960.*)
6. Altomare, F. Korovkin-type Approximation Theory and its Applications / F. Altomare, M. Campiti. – Berlin; New York: de Gruyter, 1994.

Поступила в редакцию 20.05.2016

УДК 517.958;517.956.32

В. И. КОРЗЮК^{1,2}, С. И. ПУЗЫРНЫЙ¹

**КЛАССИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ СМЕШАННЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОДНОМЕРНОГО
ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ С НЕГЛАДКИМИ УСЛОВИЯМИ КОШИ**

¹*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
korzyuk@bsu.by, serg.p94@gmail.com*

²*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
korzyuk@bsu.by*

Изучается классическое решение задачи Коши и граничной задачи для одномерного неоднородного волнового уравнения. Уравнения в задачах задаются в полуплоскости и полуполосе двух независимых переменных. На нижнем основании задаются условия Коши, негладкие в точке. В граничной задаче на боковых границах области задаются гладкие условия первого рода. Решение задачи строится методом характеристик. Доказывается единственность, устанавливаются условия, при которых существует кусочно-гладкое решение.

Ключевые слова: одномерное волновое уравнение, неоднородное уравнение, смешанная задача, негладкие начальные условия.

V. I. KORZYUK^{1,2}, S. I. PUZYRNYI¹

**CLASSICAL SOLUTION OF MIXED PROBLEMS FOR THE ONE-DIMENSIONAL WAVE EQUATION
WITH CAUCHY NONSMOOTH CONDITIONS**

¹*Belarusian State University, Minsk, Belarus,
korzyuk@bsu.by, serg.p94@gmail.com*

²*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
korzyuk@bsu.by*

The article is concerned with studying the classical solution of the Cauchy problem and the boundary problem for the one-dimensional nonhomogeneous wave equation. Equations in the problems under consideration are defined in the half-plane and in the half-band of two independent variables. The Cauchy nonsmooth conditions are assigned at the bottom of the region. First-kind smooth conditions are defined at the side boundaries of the region. Analytical solutions of problems are obtained using the method of characteristics. The uniqueness of the solution is proved, and the conditions, under which the piecewise smooth solution exists, are determined.

Keywords: one-dimensional wave equation, nonhomogeneous equation, mixed problem, nonsmooth initial conditions.

Введение. В теории дифференциальных уравнений с частными производными особое место занимают результаты, полученные методом характеристик. Построение классических решений этим методом для доказательства существования и единственности рассматриваемых задач зависит не только от правильного выбора вида граничных условий для дифференциальных уравнений с частными производными, но и от выполнения условий согласования заданных функций в угловых точках области. Как показывают результаты, от вида условий согласования зависят гладкость решений и постановка задач (см. [1–6] и др.). Как правило, условия согласования являются необходимыми и достаточными при доказательстве соответствующих утверждений. Аналогичные условия согласования возникают при решении задач, для которых задаются граничные условия с помощью негладких функций. Физическим процессом, который моделируется граничной задачей для одномерного волнового уравнения с негладкими условиями Коши, является процесс малых колебаний тонкой струны, оттянутой в начальный момент времени с помощью силы, приложенной только в одной точке.

Основное явление в теории механического удара – это распространение волн смещений в твердых телах. Экспериментальное изучение почти всех явлений удара весьма затруднительно. Наибольшая сложность состоит в том, что время, в течение которого протекает процесс удара, – относительно короткое. Основы волновой теории механического удара были созданы Б. Сен-Венаном [7–10] и другими исследователями [11–15]. При аналитическом изучении вызванных ударом колебаний интерес представляют задачи, в которых груз после удара остается в соприкосновении с ударяемым телом, в котором рассматриваются и описываются колебательные процессы [16–18].

Метод характеристик позволяет выписывать решения в явном аналитическом виде для многих задач, что дает возможность эффективно использовать при этом и численные методы. Близкими к изучаемым задачам в данной статье в случае гладких функций в граничных условиях для волнового уравнения являются задачи, представленные в работах [19, 20].

Постановка задачи. Найдем решение одномерного волнового уравнения

$$(\partial_t^2 u - a^2 \partial_x^2 u)(t, x) = f(t, x) \quad (1)$$

в области $Q = (0, \infty) \times (0, l)$ двух независимых переменных $(t, x) \in Q$, где $l \in \mathbb{R}$, $0 < l < +\infty$, $\partial_t^2 = \partial^2 / \partial t^2$, $\partial_x^2 = \partial^2 / \partial x^2$. К уравнению (1) на нижней границе ∂Q области Q присоединяются условия Коши

$$u(0, x) = \varphi(x), \quad (\partial_t u)(0, x) = \psi(x), \quad x \in [0, l], \quad (2)$$

а на боковых частях границы ∂Q – граничные условия Дирихле

$$u(t, 0) = \mu^{(1)}(t), \quad u(t, l) = \mu^{(2)}(t), \quad t \in [0, \infty]. \quad (3)$$

Будем предполагать, что функции $f, \psi, \mu^{(j)}$ ($j=1, 2$) достаточно гладкие, а именно: $f \in C^1(\bar{Q})$, $\psi \in C^1([0, l])$, $\mu^{(j)} \in C^2([0, \infty])$, где $\bar{Q} = [0, \infty] \times [0, l]$ – замыкание области Q . Функция φ является кусочно гладкой и определяется формулой

$$\varphi(x) = \begin{cases} \varphi^{(1)}(x), & x \in [0, x^*], \\ A, & x = x^*, \\ \varphi^{(2)}(x), & x \in (x^*, l], \end{cases} \quad (4)$$

где $\varphi^{(1)} \in C^2([0, x^*])$, $\varphi^{(2)} \in C^2((x^*, l])$, $x^* \in [0, l]$.

Задача состоит в нахождении функции $u: \bar{Q} \ni (t, x) \rightarrow u(t, x) \in \mathbb{R}$, удовлетворяющей уравнению (1) на \bar{Q} и условиям (2), (3). Такое решение имеется не всегда. Его существование и единственность зависят от выполнения условий согласования в угловых точках $(0, 0)$, $(0, l)$ и в особой точке $(0, x^*)$, которые будут выписаны ниже в явном виде.

Задача для однородного уравнения. Для начала в (1) положим $f(t, x) = 0$, $(t, x) \in \bar{Q}$ и рассмотрим граничную задачу для однородного уравнения

$$(\partial_t^2 u - a^2 \partial_x^2 u)(t, x) = 0, \quad (t, x) \in Q = (0, \infty) \times (0, l), \quad (5)$$

с указанными выше начальными условиями (2) и граничными условиями (3).

Для построения решения задачи (5), (2)–(4) применим метод характеристик. Выпишем общее решение рассматриваемого уравнения. Оно определено, например, в [20] и имеет вид

$$u(t, x) = g_1(x + at) + g_2(x - at), \quad (t, x) \in \bar{Q}, \quad (6)$$

где g_j ($j = 1, 2$) – произвольные достаточно гладкие функции, определенные в \mathbb{R} .

Чтобы найти функции g_1 и g_2 и определить таким образом решение рассматриваемой задачи, используем начальные и граничные условия.

Введем функции

$$\begin{aligned} g_1^{(k)}(z), \quad z \in (kl, (k+1)l), \\ g_2^{(k)}(z), \quad z \in (-kl, -(k-1)l), \end{aligned} \quad (7)$$

$k = 0, 1, 2, \dots$. Эти функции определяют g_1 и g_2 на соответствующих промежутках по формулам

$$\begin{aligned} g_1(z) &= g_1^{(k)}(z), \quad z \in (kl, (k+1)l), \\ g_2(z) &= g_2^{(k)}(z), \quad z \in (-kl, -(k-1)l). \end{aligned} \quad (8)$$

Разобьем Q на подобласти

$$Q^{(i,j)} = \{(t, x) \in Q \mid il < x + at < (i+1)l, \quad -jl < x - at < -(j-1)l\}, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, \quad (9)$$

характеристиками уравнения (5):

$$\begin{aligned} x + at &= il, \quad i \in \mathbb{N}, \\ x - at &= -jl, \quad j \in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Причина, по которой вводились функции (7) и подобласти (9), будет указана ниже. Учитывая введенные обозначения, общее решение запишется в виде

$$u(t, x) = g_1^{(i)}(x + at) + g_2^{(j)}(x - at), \quad (t, x) \in Q^{(i,j)}, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots \quad (11)$$

Таким образом, для нахождения решения задачи (5), (2)–(4) необходимо определить функции $g_1^{(i)}$, $g_2^{(j)}$, $i, j = 0, 1, 2, \dots$.

Сформулируем и докажем лемму о виде функций g_1 и g_2 .

Л е м м а. *Функции g_1 и g_2 из соотношения (6) согласно (8) определяются по формулам (12) и (13):*

$$\begin{aligned} g_1^{(0)}(z) &= \frac{1}{2a} \int_0^z \Psi(\xi) d\xi + \begin{cases} \frac{1}{2} \varphi^{(1)}(z) + C_1, & z \in (0, x^*), \\ \frac{1}{2} \varphi^{(2)}(z) + C_2, & z \in (x^*, l), \end{cases} \\ g_2^{(0)}(z) &= -\frac{1}{2a} \int_0^z \Psi(\xi) d\xi + \begin{cases} \frac{1}{2} \varphi^{(1)}(z) - C_1, & z \in (0, x^*), \\ \frac{1}{2} \varphi^{(2)}(z) - C_2, & z \in (x^*, l); \end{cases} \\ g_1^{(k+1)}(z) &= \mu_2 \left(\frac{z-l}{a} \right) - g_2^{(k)}(2l-z), \quad (k+1)l < z < (k+2)l, \end{aligned} \quad (12)$$

$$g_2^{(k+1)}(z) = \mu_1 \left(-\frac{z}{a} \right) - g_1^{(k)}(-z), \quad -(k+1)l < z < -kl, \quad (13)$$

где C_1, C_2 – произвольные постоянные.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Формулы (12) получаем, удовлетворяя условиям Коши. Оставшиеся функции (7) определяются из граничных условий. Запишем условия (3) для общего решения в областях $Q^{(0,1)}$ и $Q^{(1,0)}$:

$$u(t,0) = g_1^{(0)}(at) + g_2^{(1)}(-at) = \mu_1(t), \quad 0 < at < l, \quad -l < -at < 0, \quad (14)$$

$$u(t,l) = g_1^{(1)}(l+at) + g_2^{(0)}(l-at) = \mu_2(t), \quad l < l+at < 2l, \quad 0 < l-at < l.$$

Отсюда следует, что

$$g_1^{(1)}(z) = \mu_2 \left(\frac{z-l}{a} \right) - g_2^{(0)}(2l-z), \quad l < z < 2l, \quad (15)$$

$$g_2^{(1)}(z) = \mu_1 \left(-\frac{z}{a} \right) - g_1^{(0)}(-z), \quad -l < z < 0.$$

Теперь докажем формулы (13) методом математической индукции. Запишем граничные условия в областях $Q^{(k,k+1)}$ и $Q^{(k+1,k)}$:

$$u(t,0) = g_1^{(k)}(at) + g_2^{(k+1)}(-at) = \mu_1(t), \quad (t,0) \in Q^{(k,k+1)}, \quad (16)$$

$$u(t,l) = g_1^{(k+1)}(l+at) + g_2^{(k)}(l-at) = \mu_2(t), \quad (t,l) \in Q^{(k+1,k)}.$$

Выражая $g_1^{(k+1)}(z)$ и $g_2^{(k+1)}(z)$, получим формулы (13).

Таким образом, формулы (12) и (13) доказаны. С их помощью можно построить решение по формуле (11). Несложно заметить, что это решение будет содержать произвольные постоянные C_1 и C_2 . Для того чтобы избавиться от них, проанализируем структуру решения. Оно определяется через сумму двух функций $g_1^{(i)}$ и $g_2^{(j)}$, заданных рекуррентно. Если расписать эти функции, становится понятно, что они будут состоять из суммы гладких μ_1 и μ_2 и негладких $g_1^{(0)}$ и $g_2^{(0)}$ функций. Из этого, используя формулы (13), делаем вывод, что функции $g_1^{(i)}$ и $g_2^{(j)}$ могут быть представлены в виде суммы

$$g_1^{(i)}(z) = s(z) + \begin{cases} -g_2^{(0)}((i+1)l-z), & i - \text{нечетное число,} \\ g_1^{(0)}(z-il), & i - \text{четное,} \end{cases} \quad (17)$$

$$g_2^{(j)}(z) = s(z) + \begin{cases} -g_1^{(0)}(-(j-1)l-z), & j - \text{нечетное,} \\ g_2^{(0)}(jl+z), & j - \text{четное,} \end{cases}$$

где $s(z)$ – символическое обозначение любых дважды непрерывно дифференцируемых функций. Это обозначение вводится для упрощения рассуждений. Поскольку решение уже было построено выше, сейчас нас интересует только гладкость, а не точное выражение. Учитывая это, распишем функции $g_1^{(0)}$ и $g_2^{(0)}$, выделяя из них негладкие слагаемые:

$$g_1^{(i)}(z) = s(z) + \begin{cases} \begin{cases} -\frac{1}{2}\varphi^{(1)}((i+1)l-z) + C_1, & (i+1)l - x^* < z < (i+1)l, \\ -\frac{1}{2}\varphi^{(2)}((i+1)l-z) + C_2, & il < z < (i+1)l - x^*, \end{cases} & i - \text{нечетное,} \\ \begin{cases} \frac{1}{2}\varphi^{(1)}(z-il) + C_1, & il < z < il + x^*, \\ \frac{1}{2}\varphi^{(2)}(z-il) + C_2, & il + x^* < z < (i+1)l; \end{cases} & i - \text{четное,} \end{cases} \quad (18)$$

$$g_2^{(j)}(z) = s(z) + \begin{cases} \begin{cases} -\frac{1}{2}\varphi^{(1)}(-(j-1)l-z) - C_1, & -(j-1)l - x^* < z < -(j-1)l, \\ -\frac{1}{2}\varphi^{(2)}(-(j-1)l-z) - C_2, & -jl < z < -(j-1)l - x^*, \end{cases} & j - \text{нечетное,} \\ \begin{cases} \frac{1}{2}\varphi^{(1)}(jl+z) - C_1, & -jl < z < -jl + x^*, \\ \frac{1}{2}\varphi^{(2)}(jl+z) - C_2, & -jl + x^* < z < -(j-1)l. \end{cases} & j - \text{четное,} \end{cases} \quad (19)$$

Как видим, произвольные постоянные C_1 и C_2 входят в функции $g_1^{(i)}$ и $g_2^{(j)}$ с разными знаками. Это означает, что построенное решение u , которое является суммой этих функций, либо не будет зависеть от произвольных постоянных, когда они взаимоуничтожаются, либо будет зависеть от их разности $C_2 - C_1$.

Для определения разности произвольных постоянных используем начальные условия в точке x^* . Возьмем $(t, x) \in Q^{(0,0)}$ и будем устремлять ее к $(0, x^*)$:

$$\begin{aligned} u(t, x) &= g_1^{(0)}(x+at) + g_2^{(0)}(x-at) = \\ &= \frac{1}{2a} \int_{x-at}^{x+at} \psi(\xi) d\xi + \frac{1}{2}\varphi^{(2)}(x+at) + C_2 + \frac{1}{2}\varphi^{(1)}(x-at) - \\ &- C_1 \xrightarrow{t \rightarrow 0} \frac{1}{2}(\varphi^{(1)}(x^*) + \varphi^{(2)}(x^*)) + C_2 - C_1 = u(0, x^*) = \varphi(x^*) = A. \end{aligned} \quad (20)$$

Из формулы (20) следует, что

$$C_2 - C_1 = A - \frac{\varphi^{(1)}(x^*) + \varphi^{(2)}(x^*)}{2}. \quad (21)$$

Итак, мы доказали следующее.

Т е о р е м а 1. *Решение задачи для уравнения (5) с условиями (2), (3) существует, единственно и находится с помощью формул (11), (12), (13).*

Поскольку классическое решение – кусочно дважды непрерывно дифференцируемая в области Q функция, в дальнейшем займемся исследованием гладкости построенного решения. Отметим также тот факт, что в случае, когда $C_1 \neq C_2$, формула построения решения будет отличаться от формулы для решения задачи с гладкими условиями Коши (см. [1]).

Условия согласования. На предыдущем этапе рассматриваемая область Q разбивалась на подобласти, в каждой из которых решение $u(t, x)$ определялось по-разному. Потребуем, чтобы построенное решение было дважды непрерывно дифференцируемо при переходе через границы подобластей $Q^{(i,j)}$. Для этого выписываются скачки функции u и ее производных на этих грани-

цах и они полагаются равными нулю. Это проделано, например, в работе [1]. В результате получены следующие условия согласования:

$$\begin{aligned} \varphi(0) &= \mu_1(0), & \varphi(l) &= \mu_2(0), \\ \psi(0) &= \mu_1'(0), & \psi(l) &= \mu_2'(0), \\ a^2\varphi''(0) &= \mu_1''(0), & a^2\varphi''(l) &= \mu_2''(0), \end{aligned} \quad (22)$$

при выполнении которых построенное выше решение будет дважды непрерывно дифференцируемо в окрестности границ подобластей $Q^{(i,j)}$, не совпадающих с границей области Q . Если эти условия выполняться не будут, то решение не будет гладким при переходе через данные характеристики.

Исследование гладкости решения граничной задачи. Для исследования построенного решения на гладкость будем записывать его в конкретных областях $Q^{(i,j)}$ и определять скачки функции $u(t,x)$ и ее производных на характеристиках, на которых возможна негладкость решения из-за негладкости начальных условий в точке x^* :

$$\begin{aligned} x + at &= il + x^*, & i &\in \mathbb{N}, \\ x - at &= -jl + x^*, & j &\in \mathbb{N}_0. \end{aligned} \quad (23)$$

Возьмем некоторое четное неотрицательное число k и запишем решение в области $Q^{(k,k)}$:

$$\begin{aligned} u(t,x) &= g_1^{(k)}(x+at) + g_2^{(k)}(x-at) = \\ &= s(t,x) + \begin{cases} \frac{1}{2}(\varphi^{(1)}(x+at-kl) + \varphi^{(1)}(x-at+kl)), & kl < x+at < kl+x^*, \quad -kl < x-at < -kl+x^*, \\ \frac{1}{2}(\varphi^{(1)}(x+at-kl) + \varphi^{(2)}(x-at+kl)) + (C_2 - C_1), & kl < x+at < kl+x^*, \quad -kl+x^* < x-at < -(k-1)l, \\ \frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x+at-kl) + \varphi^{(1)}(x-at+kl)) - (C_2 - C_1), & kl+x^* < x+at < (k+1)l, \quad -kl < x-at < -kl+x^*, \\ \frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x+at-kl) + \varphi^{(2)}(x-at+kl)), & kl+x^* < x+at < (k+1)l, \quad -kl+x^* < x-at < -(k-1)l. \end{cases} \end{aligned} \quad (24)$$

Для упрощения выкладок введем оператор

$$\Delta_{\{z(t,x)\}} u(t,x) = \lim_{z(t,x) \rightarrow x^*+0} u(t,x) - \lim_{z(t,x) \rightarrow x^*-0} u(t,x). \quad (25)$$

Здесь $z: (t,x) \rightarrow z(t,x) \in \mathbb{R}$ – произвольная линейная функция. Вообще говоря, такое определение некорректно. Но в нашем случае в качестве $z(t,x)$ будут выступать суммы $x+at$ или $x-at$ и некоторых чисел. А поскольку решение $u(t,x)$ – зависит от $x+at$ и $x-at$, то пределы будут определяться однозначно.

Используем введенный оператор для записи скачков в области $Q^{(k,k)}$:

$$\begin{aligned}\Delta_{\{x+at-kl\}}u(t,x) &= \frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(1)}(x^*), \\ \Delta_{\{x-at+kl\}}u(t,x) &= \frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(1)}(x^*) - A.\end{aligned}\tag{26}$$

Теперь запишем для $Q^{(k+1,k)}$:

$$\begin{aligned}u(t,x) &= g_1^{(k+1)}(x+at) + g_2^{(k)}(x-at) = \\ &= s(t,x) + \begin{cases} \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(1)}((k+2)l-(x+at)) + \varphi^{(1)}(x-at+kl)\right), \\ \quad (k+2)l - x^* < x+at < (k+2)l, \quad -kl < x-at < -kl+x^*, \\ \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(2)}((k+2)l-(x+at)) + \varphi^{(1)}(x-at+kl)\right) + (C_2 - C_1), \\ \quad (k+1)l < x+at < (k+2)l - x^*, \quad -kl < x-at < -kl+x^*, \\ \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(2)}((k+2)l-(x+at)) + \varphi^{(2)}(x-at+kl)\right), \\ \quad (k+1)l < x+at < (k+2)l - x^*, \quad -kl+x^* < x-at < -(k-1)l.\end{cases}\end{aligned}\tag{27}$$

Скачки в области $Q^{(k+1,k)}$:

$$\begin{aligned}\Delta_{\{(k+2)l-(x+at)\}}u(t,x) &= -\frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(2)}(x^*), \\ \Delta_{\{(x-at)+kl\}}u(t,x) &= \frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(2)}(x^*) - A.\end{aligned}\tag{28}$$

Аналогично для $Q^{(k,k+1)}$:

$$\begin{aligned}u(t,x) &= g_1^{(k)}(x+at) + g_2^{(k+1)}(x-at) = \\ &= s(x) + \begin{cases} \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(1)}(x+at-kl) + \varphi^{(1)}(-kl-(x-at))\right), \\ \quad kl < x+at < kl+x^*, \quad -kl-x^* < x-at < -kl, \\ \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(2)}(x+at-kl) + \varphi^{(1)}(-kl-(x-at))\right) + (C_2 - C_1), \\ \quad kl < x+at < kl+x^*, \quad -(k+1)l < x-at < -kl-x^*, \\ \frac{1}{2}\left(-\varphi^{(2)}(x+at-kl) + \varphi^{(2)}(-kl-(x-at))\right), \\ \quad kl+x^* < x+at < (k+1)l, \quad -(k+1)l < x-at < -kl-x^*,\end{cases}\end{aligned}\tag{29}$$

$$\begin{aligned}\Delta_{\{x+at-kl\}}u(t,x) &= \frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(1)}(x^*), \\ \Delta_{\{-kl-(x-at)\}}u(t,x) &= -\frac{1}{2}\left(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)\right) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(1)}(x^*) - A.\end{aligned}\tag{30}$$

Теперь предположим, что k – нечетное. Рассуждая аналогично, получаем:

$$\begin{aligned} Q^{(k,k)}: \quad \Delta_{\{(k+1)l-(x+at)\}} u(t,x) &= -\frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(2)}(x^*), \\ \Delta_{\{(k-1)l-(x-at)\}} u(t,x) &= -\frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(2)}(x^*) - A; \end{aligned} \quad (31)$$

$$\begin{aligned} Q^{(k,k+1)}: \quad \Delta_{\{(k+1)l-(x+at)\}} u(t,x) &= -\frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(2)}(x^*), \\ \Delta_{\{(k+1)l+(x-at)\}} u(t,x) &= \frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(2)}(x^*) - A; \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} Q^{(k+1,k)}: \quad \Delta_{\{x+at-(k+1)l\}} u(t,x) &= \frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) + (C_2 - C_1) = A - \varphi^{(1)}(x^*), \\ \Delta_{\{-(k-1)l-(x-at)\}} u(t,x) &= -\frac{1}{2}(\varphi^{(2)}(x^*) - \varphi^{(1)}(x^*)) - (C_2 - C_1) = \varphi^{(1)}(x^*) - A. \end{aligned} \quad (33)$$

На основании этих формул можем сделать вывод, что решение не будет непрерывным в случае разрывности φ . Сформулируем полученные результаты в виде теоремы.

Т е о р е м а 2. *Решение задачи для однородного волнового уравнения (5) с негладкими начальными условиями (2), (4) и гладкими граничными условиями (3) в случае, когда они удовлетворяют условиям согласования (22), не будет гладким во всей области постановки задачи Q . На характеристиках (23) решение или его производные терпят разрыв, скачки решения при переходе через характеристики линейно зависят от скачков функции φ и ее производных, определяются по формулам (26), (28), (30)–(33).*

Следует отметить, что скачки решения и его производных постоянны, зависят от числа A и пропорциональны скачкам функции φ , описывающей профиль струны в начальный момент времени, и соответствующих ее производных в точке x^* .

Рассмотрим три частных случая задания негладких начальных условий.

$$1. \quad \varphi(x^* - 0) = \varphi(x^* + 0) = A.$$

Из формул (26), (28), (30)–(33) видно, что в таком случае решение из класса $C(\bar{Q})$ и находится по формуле Даламбера в $Q^{(0,0)}$.

$$2. \quad \varphi(x^* - 0) \neq \varphi(x^* + 0), \quad A = \frac{1}{2}(\varphi(x^* - 0) + \varphi(x^* + 0)).$$

В таком случае решение уже не будет непрерывным, но разность $C_2 - C_1 = 0$ и решение можно найти по формуле Даламбера $Q^{(0,0)}$.

$$3. \quad \varphi(x^* - 0) \neq \varphi(x^* + 0), \quad A \neq \frac{1}{2}(\varphi(x^* - 0) + \varphi(x^* + 0)).$$

Решение $Q^{(0,0)}$ будет разрывным и отличаться от решения, получаемого по формуле Даламбера, на константу $C_2 - C_1 \neq 0$.

Решение граничной задачи для неоднородного уравнения. Итак, решение граничной задачи для однородного уравнения нами построено. Используем его для нахождения решения задачи для неоднородного уравнения (1) с начальными условиями (2) и граничными условиями (3).

Решение этой задачи будем искать в виде

$$u(t,x) = \tilde{u}(t,x) + v(t,x), \quad (t,x) \in Q, \quad (34)$$

где \tilde{u} – решение задачи для однородного уравнения, найденное выше, а v – решение неоднородного уравнения (1) с однородными начальными условиями:

$$v(0, x) = 0, \quad v_t(0, x) = 0. \quad (35)$$

Для нахождения функции v воспользуемся методом Дюамеля (более подробное его описание можно найти в работе [1]), в соответствии с которым частное решение v имеет следующую формулу:

$$v(t, x) = \int_0^t w(t - \tau, \tau, x) d\tau, \quad (36)$$

где $w(t, \tau, x)$ – решение уравнения

$$(\partial_t^2 w - a^2 \partial_x^2 w)(t, \tau, x) = 0, \quad t, \tau \in (0, \infty), \quad x \in [0, l], \quad (37)$$

удовлетворяющее условиям Коши

$$w(0, \tau, x) = 0, \quad w_t(0, \tau, x) = f(\tau, x). \quad (38)$$

Решение данной задачи определяется по формулам (11), (8), (12), (13), (21).

Для определения условий согласования воспользуемся представлением решения (34). Выразим из него решение однородного уравнения

$$\tilde{u}(t, x) = u(t, x) - v(t, x), \quad (t, x) \in Q, \quad (39)$$

которое, с учетом условий (35) для функции v , является решением задачи вида (2), (3), (5):

$$(\partial_t^2 \tilde{u} - a^2 \partial_x^2 \tilde{u})(t, x) = 0, \quad (t, x) \in Q = (0, \infty) \times (0, l),$$

$$\tilde{u}(0, x) = u(0, x) - v(0, x) = \varphi(x), \quad \tilde{u}_t(0, x) = u_t(0, x) - v_t(0, x) = \psi(x), \quad x \in (0, l), \quad (40)$$

$$\tilde{u}(t, 0) = u(t, 0) - v(t, 0) = \tilde{\mu}_1(t), \quad \tilde{u}(t, l) = u(t, l) - v(t, l) = \tilde{\mu}_2(t), \quad t > 0.$$

Для этой задачи имеем условия согласования (22). Для задачи (1)–(4) однородные условия согласования в угловых точках $(0, 0)$, $(0, l)$ имеют вид, указанный в [1]. Следовательно, к (22) необходимо добавить

$$a^2 \varphi^{(1)}(0) - \mu_1(0) + f(0, 0) = 0, \quad \mu_2(l) - a^2 \varphi^{(2)}(l) - f(0, l) = 0. \quad (41)$$

Как было показано выше, если выполняются условия согласования, то w дважды непрерывно дифференцируема. В таком случае и функция v , определяемая по формуле (36), также обладает необходимой гладкостью. В силу линейности оператора дифференцирования из этого следует, что изучение гладкости решения задачи для неоднородного уравнения сводится к исследованию гладкости решения задачи для однородного.

С учетом сказанного выше, сформулируем полученные результаты в виде теоремы.

Т е о р е м а 3. *Решение задачи (1), (2), (3) существует, единственно и представляется в виде суммы (34) решения задачи для однородного уравнения (5) с условиями (2), (3) и решения задачи для неоднородного уравнения (1) с однородными условиями (35).*

Решение первой задачи находится по формулам (11)–(13) и его гладкость зависит от гладкости начальных условий, скачки выражаются по формулам (27)–(33). Также для гладкости необходимо выполнение условия согласования (22).

Решение второй задачи строится по формуле (36) с помощью формул (11)–(13) и будет гладким при выполнении условий согласования (42).

Заключение. В статье были сформулированы условия согласования, при выполнении которых существует классическое решение задачи в случае достаточной гладкости условий Коши. Построено классическое решение рассматриваемой граничной задачи и показана зависимость его гладкости от гладкости условий Коши. Важным является тот факт, что в случае негладких в точке начальных условий формула построения решения задачи отличается от формулы для построения решения задачи с гладкими начальными условиями.

Список использованной литературы

1. Корзюк, В. И. Об условиях согласования в граничных задачах для гиперболических уравнений / В. И. Корзюк, И. С. Козловская // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2013. – Т. 57, № 5. – С. 37–42.
2. Корзюк, В. И. Классическое решение первой смешанной задачи для уравнений Клейна – Гордона – Фока в криволинейной полуполосе / В. И. Корзюк, И. И. Столярчук // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2014. – Т. 58, № 3. – С. 9–15.
3. Моисеев, Е. И. Классическое решение задачи с интегральным условием для одномерного волнового уравнения / Е. И. Моисеев, В. И. Корзюк, И. С. Козловская // Дифференц. уравнения. – 2014. – Т. 50, № 10. – С. 1373–1385.
4. Корзюк, В. И. Граничные задачи для нестрого гиперболического уравнения третьего порядка / В. И. Корзюк, А. А. Мандрюк // Дифференц. уравнения. – 2016. – Т. 52, № 2. – С. 209–219.
5. Корзюк, В. И. Первая смешанная задача в криволинейной полуполосе уравнения Клейна – Гордона – Фока с переменными коэффициентами / В. И. Корзюк, И. И. Столярчук // Дифференц. уравнения. – 2012. – Т. 48, № 5. – С. 700–709.
6. Корзюк, В. И. Классическое решение первой смешанной задачи одномерного волнового уравнения с условиями типа Коши / В. И. Корзюк, И. С. Козловская, С. Н. Наумовец // Вес. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. фіз.-мат. навук. – 2015. – № 1. – С. 7–20.
7. Saint-Venant, B. Choc longitudinal de deux barres elastiques dont l'une est extremement courte on extremement roide par rapport a l'autre / B. Saint-Venant // Comptes Rendus. – 1868. – Vol. 66, N 13. – P. 650–653.
8. Saint-Venant, B. Du choc longitudinal d'une barre elastique libre contre une barre elastique d'autre matiere on d'autre grosseur fixee au bout non heurtee; consideration du cas extreme on la barre heurtante est tres raide et tres courte / B. Saint-Venant // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 8. – P. 359–365.
9. Saint-Venant, B. Solution en terms finis et simples, du probleme du choc longitudinal par un corps quelconque, d'une barre elastique fixee a son extremite non heurtee / B. Saint-Venant // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 10. – P. 423–427.
10. Saint-Venant, B. Resistance vive on dynamique des soliders. Representation graphique des lois du choc longitudinal, subi a une de ses extremites par une tige ou barre prismatique assujetti a l'extremite opposee / B. Saint-Venant, M. Flamant // Comptes Rendus. – 1883. – N 3. – P. 127–133; N 4. – P. 214–222; N 5. – P. 281–290; N 6. – P. 444–447.
11. Boussinesq, J. Sur le choc d'une plaque elastique plane, supposee indefinie en longueur et en largeur, par un solide qui vient la heurter perpendiculairement eu un de ses points et qui lui reste uni / J. Boussinesq // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 5. – P. 123–125.
12. Boussinesq, J. Du choc longitudinal d'une barre prismatique fixee a un bout et heurtee a l'autre / J. Boussinesq // Comptes Rendus. – 1883. – Vol. 97, N 2. – P. 154–157.
13. Sebert. Sur les vibrations longitudinales des barres elastiques dont les extremites sont soumises a des efforts quelconques / Sebert, Hugonit // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 7. – P. 338–340.
14. Sebert. Sur le choc longitudinal d'une tige elastique fixee par l'une de ses extremites / Sebert, Hugonit // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 8. – P. 381–384.
15. Sebert. Sur les vibrations longitudinales des verges elastiques et le mouvement d'une tige portant a son extremite une masse additinelle / Sebert, Hugonit // Comptes Rendus. – 1882. – Vol. 95, N 18. – P. 775–777.
16. Лазарян, В. А. О динамических усилиях в упругих приборах однородных поездов при сопротивлениях относительным перемещениям экипажей / В. А. Лазарян // Тр. Днепропетр. ин-та инженеров ж.-д. транспорта. – 1950. – Вып. 20. – С. 3–32.
17. Герсеванов, Н. М. Теория продольного удара с применением к определению сопротивления свай / Н. М. Герсеванов // Собр. соч.: [в 2 т.]. – М.: Стройвоенмориздат, 1948. – Т. 1. – С. 70–94.
18. Маврин, А. И. К теории ударного погружения свай / А. И. Маврин // Изв. вузов (строительство и архитектура). – 1967. – № 8. – С. 24–28.
19. Корзюк, В. И. Уравнения математической физики: учеб. пособие / В. И. Корзюк. – Минск: БГУ, 2010.
20. Корзюк, В. И. Решение задачи Коши для гиперболического уравнения с постоянными коэффициентами в случае двух независимых переменных / В. И. Корзюк, И. С. Козловская // Дифференц. уравнения. – 2012. – Т. 48, № 5. – С. 700–709.

Поступила в редакцию 29.04.2016

УДК 512.74,512.552.13

В. И. ЯНЧЕВСКИЙ

**ГРУППЫ УАЙТХЕДА, ПРИВЕДЕННЫЕ НОРМЫ
И ЦИКЛИЧНОСТЬ СПЕЦИАЛЬНЫХ АЛГЕБР АДЗУМАЙИ**

*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: yanch@im.bas-net.by*

В статье описана мультипликативная структура и приведенные нормы центральных k -алгебр A с делением в двух следующих случаях: (i) k – пополнение поля функций p -адиической кривой относительно дискретных нормирований, поля вычетов которых – конечные расширения \mathbb{Q}_p , и A – слабо разветвленная k -алгебра с делением; (ii) A – тела некоммутативных рациональных функций над p -адиическими алгебрами с делением. Получены достаточные условия цикличности алгебр из (i). В частности, установлена цикличность алгебр бесквадратного индекса.

Ключевые слова: группы Уайтхеда, алгебры с делением, циклические алгебры, приведенные нормы простых алгебр, тела некоммутативных рациональных функций.

V. I. YANCHEVSKIĬ

**WHITEHEAD GROUPS, REDUCED NORMS
AND CYCLICITY OF SOME SPECIAL AZUMAYA ALGEBRAS**

*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: yanch@im.bas-net.by*

We describe the multiplicative structure and the reduced norms for central division k -algebras A in the two following cases: (i) let k be a completion of the function field of the p -adic curve with respect to discrete valuations with finite extensions of \mathbb{Q}_p as residue fields and let A be tamely ramified division k -algebra; (ii) let A be skew-fields of non-commutative rational functions over p -adic division algebras. We also obtain some sufficient conditions for cyclicity of algebras from (i). In particular we prove that any algebra of square-free index from (i) is cyclic.

Keywords: Whitehead groups, division algebras, cyclic algebras, reduced norms of simple algebras, skew-fields of non-commutative rational functions.

Пусть A – центральная простая конечномерная алгебра над полем k . Напомним, что группой Уайтхеда $K_1(A)$ алгебры A называется фактор-группа $A^*/[A^*, A^*]$, где $[A^*, A^*]$ – коммутант мультипликативной группы A^* алгебры A . Вычисление группы $K_1(A)$ является весьма трудной задачей, поскольку включает в себе задачи вычисления приведенных групп Уайтхеда $SK_1(A)$ и группы приведенных норм (определение см., напр., в [1]), как видно из следующей точной последовательности, получаемой с помощью использования гомоморфизма приведенной нормы Nrd :

$$1 \rightarrow SK_1(A) \rightarrow K_1(A) \rightarrow \text{Nrd}(A^*) \rightarrow 1, \quad (1)$$

где $SK_1(A) = SL(1, A) / [A^*, A^*]$ и $SL(1, A)$ – ядро гомоморфизма Nrd .

Для дальнейшего нам потребуются следующие определения.

Определение 1. Степень простой центральной алгебры называется квадратный корень из ее размерности над центром.

Определение 2. Степень простой центральной алгебры с делением называется индексом.

В настоящее время известно, что приведенные группы $SK_1(A)$ в случае алгебр A бесквадратных индексов весьма часто оказываются нетривиальными. Так, например, согласно результату А. С. Меркурьева [2], по любой центральной простой алгебре A бесквадратного индекса можно построить с помощью подходящего центрального расширения скаляров алгебру с нетривиальной приведенной группой Уайтхеда. Таким образом, вычисление группы $K_1(A)$ содержит все трудности, связанные с вычислением групп $SK_1(A)$. Все же класс полей k и алгебр A , для которых группы $SK_1(A)$ нетривиальны, достаточно широк и важен для приложений. В случае тривиальности группы $SK_1(A)$ последовательность (1) немедленно приводит к изоморфизму $K_1(A) \cong \text{Nrd}(A^*)$. С учетом изоморфизма $A^*/SL(1, A) \cong \text{Nrd}(A^*)$ описание мультипликативной структуры группы A^* является существенным при вычислении группы $K_1(A)$. Одной из целей данной работы является рассмотрение вышеупомянутой задачи вычисления $K_1(A)$ в случаях,

(i) когда k – пополнение поля функций p -адической кривой с p -адическим полем в качестве поля вычетов, A – алгебра с делением центральная над k индекса взаимно простого с p ;

(ii) когда A – тело некоммутативных рациональных функций над p -адической алгеброй с делением.

Вторая задача, рассматриваемая в статье, относится к проблеме цикличности алгебр из случая (i). Заметим, что в случае алгебр A с делением над полем функций p -адической кривой таких, что их индексы примарны и взаимно просты с p , Д. Солтман, применяя геометрические методы, установил их цикличность [3]. В случае алгебр из (i) мы устанавливаем ряд достаточных условий для их цикличности с помощью прямого алгебраического доказательства.

Обратимся вначале к первой задаче. Заметим, что в этом случае задача вычисления группы $K_1(A)$ может быть редуцирована к алгебрам примарного индекса, поскольку имеет место следующая точная последовательность (см. [4, предложение 2]):

$$1 \rightarrow (k^*)^{r-1} \rightarrow K_1(A_1) \times \dots \times K_1(A_r) \rightarrow K_1(A) \rightarrow 1,$$

где $A = A_1 \otimes_k \dots \otimes_k A_r$, A_i – алгебра с делением примарного индекса $p_i^{a_i}$ и p_i ($i = 1, \dots, r$) – различные простые числа, а $(k^*)^{r-1}$ – прямое произведение $(r-1)$ -го экземпляра группы k^* . Кроме того,

$\text{Nrd}(A^*) = \prod_{i=1}^r \text{Nrd}(A_i^*)$. Напомним, что в рассматриваемом нами случае (i) имеет место тривиальность группы $SK_1(A)$. Тогда из последовательности (1) немедленно следует, что, не ограничивая общности, можно считать индекс A примарным. Для описания группы $\text{Nrd}(A^*)$ в этом случае нам потребуется знание мультипликативной структуры A^* алгебры A , которая может быть описана следующим утверждением.

Теорема 1. Пусть для поля k и алгебры A имеет место случай (i). Тогда

$$A^* = \langle \pi_A \rangle U_{\bar{A}}(1 + M_A),$$

где π_A – простой элемент кольца нормирования O_A алгебры A ; $U_{\bar{A}}$ – подгруппа группы единиц кольца O_A , изоморфная мультипликативной группе алгебры вычетов \bar{A} алгебры A ; $1 + M_A$ – подгруппа элементов вида $1 + m$ с m , принадлежащим идеалу нормирования M_A .

Доказательство. Пусть $I \subset A$ – тело представителей для \bar{A} и $U_{\bar{A}}$ – его мультипликативная группа. Ясно, что произвольный элемент a из A^* имеет вид $a = \pi_A^e i(1 + m)$, где $i \in I$, а $1 + m \in (1 + M_A)$. Так как I изоморфно \bar{A} , то теорема доказана.

Замечание 1. Предположение о том, что A является алгеброй с делением, не приводит к ограничению общности, поскольку и группы Уайтхеда, и группы приведенных норм стабильны относительно взятия матричных алгебр над алгебрами с делением.

Следствие 1. $\text{Nrd}(A^*) = \langle \text{Nrd}(\pi_A) \rangle \langle \text{Nrd}(U_{\bar{A}}) \rangle (1 + M_k)$, где M_k – максимальный двусторонний идеал в кольце нормирования O_k поля k .

В случае (ii) наше описание группы приведенных норм будет основано на описании группы приведенных норм из работы [4] для алгебр некоммутативных рациональных функций над произвольным полем. Напомним вначале необходимые определения и обозначения.

З а м е ч а н и е 2. Автор признателен А. В. Прокопчуку за полезные обсуждения вышеприведенных результатов.

О п р е д е л е н и е 3. Пусть B – алгебра с делением и автоморфизмом ν конечного внешнего порядка r (т. е. $\nu^r = i_g, i_g$ обозначает внутренний автоморфизм B с помощью элемента g , и g может быть выбран инвариантным относительно ν). Кольцом многочленов $B[X, \nu]$ от переменной X относительно ν с коэффициентами в B называется кольцо с образующими B и X и следующим определяющим соотношением $Xb = b^\nu X$ для произвольного $b \in B$.

Нетрудно видеть, что центром кольца $B[X, \nu]$ является кольцо многочленов $t[x]$, где t – поле инвариантов автоморфизма ν , ограниченного на центр B , а $x = g^{-1}X^r$.

Хорошо известно, что кольцо $B[X, \nu]$ является кольцом Оре и поэтому обладает телом центральных частных $B(X, \nu)$. Таким образом, всякий элемент из $B(X, \nu)$ представляется в виде $P(X)\lambda(x)^{-1}$, где $\lambda(x)$ – многочлен из $t[x]$.

Пусть теперь $A = B(X, \nu)$, тогда A – центральная алгебра с делением над полем рациональных функций $k = t(x)$. Для произвольного неприводимого многочлена $f \in t[x]$ обозначим через $t(x)_f$ пополнение поля $t(x)$ относительно нормирования, соответствующего многочлену f , а через O_f – кольцо этого нормирования. Пусть $A(X, \nu) \otimes_{t(x)} t(x)_f \cong M_m(D_f)$, где $M_m(D_f)$ – полная матричная алгебра степени $m \geq 1$ над алгеброй с делением D_f ; $\overline{D_f}, \overline{t(x)}_f$ – соответственно алгебра вычетов и поле вычетов D_f и $t(x)_f$. Положим $q = [\overline{D_f} : \overline{t(x)}_f]$ и $i(f) = \sqrt{e^{-1}q}$, где e – индекс ветвления D_f над $t(x)_f$. Далее для каждого неприводимого, унитарного многочлена $f \in t[x]$ обозначим через u_f элемент $(-1)^{(r+1)i(f)\deg f} N_{t(x)_f/t}(g)^{i(f)\deg f} \Gamma^{-1} f^{i(f)}$.

Т е о р е м а 2. Пусть t – конечное расширение \mathbb{Q}_p . Тогда группа $\text{Nrd}(A^*)$ порождается группой $N_{Z(B)/t}(Z(B)^*)$ ($Z(B)$ – центр алгебры B) и всеми элементами u_f .

Доказательство немедленно следует из результатов [4] и того факта, что отображение приведенной нормы алгебры над $Z(B)$ сюръективно.

Наконец остановимся кратко на результатах описания мультипликативной структуры алгебр с унитарными инволюциями. Их полному изложению будет посвящена другая статья автора.

Напомним, что под мультипликативной структурой алгебры A с унитарной инволюцией τ обычно понимается описание мультипликативной группы этой алгебры, индуцируемое унитарной группой, связанной с соответствующей изотропной эрмитовой формой. В случае унитарных инволюций речь идет об описании мультипликативной группы, связанной с фактор-группой $A^* / \Sigma(A, \tau)$, где $\Sigma(A, \tau)$ является подгруппой в A^* , порожденной τ -симметрическими элементами из A^* . Хорошо известно, что фактор-группа $A^* / \Sigma(A, \tau)$ абелева, поскольку коммутант $[A^*, A^*]$ содержится в $A^* / \Sigma(A, \tau)$. Кроме того, изотропность эрмитовой формы влечет возможность ограничиться при рассмотрении общего случая алгебрами A с делением. Важную роль в случае рассматриваемых полей (функций p -адических кривых и их пополнений) играет следующий факт: приведенные унитарные группы Уайтхеда соответствующих алгебр тривиальны (см. [5, 6]). Для более точных формулировок напомним следующие определения.

О п р е д е л е н и е 4. Пусть A – конечномерная центральная K -алгебра с делением с унитарной инволюцией τ и $k = \{a \in K \mid a^\tau = a\}$. Положим $\Sigma'(A, \tau) = \{a \in A^* \mid \text{Nrd}(a) \in k\}$, где $\text{Nrd} : A^* \rightarrow K^*$ – гомоморфизм приведенной нормы. Приведенной унитарной группой Уайтхеда алгебры A относительно инволюции τ называется фактор-группа $\Sigma'(A, \tau) / \Sigma(A, \tau)$.

Вышеупомянутая тривиальность приведенных унитарных групп Уайтхеда относится и к двум следующим случаям: K – пополнение поля функций p -адической кривой относительно дискретного нормирования такого, что его поле вычетов имеет нулевую характеристику; и A – тело некоммутативных рациональных функций, центр которого – поле рациональных функций с полем констант, являющимся конечным расширением поля \mathbb{Q}_p .

Таким образом, в обоих упомянутых случаях вместо группы $A^* / \Sigma(A, \tau)$ можно рассматривать фактор-группу $A^* / \Sigma'(A, \tau)$. В случае полного поля K имеет место следующее описание мультипликативной структуры алгебры с делением A и унитарной инволюции τ .

Теорема 3. $A^* = \langle \pi_A \rangle U_{\tilde{A}}(1 + M_A)$, где π_A – подходящий простой τ -симметрический элемент в τ -инвариантном кольце нормирования O_A , \tilde{A} – мультипликативная группа неразветвленного τ -инвариантного и π_A -инвариантного подъема алгебры вычетов \bar{A} в A^* .

Ввиду τ -инвариантности π_A и $U_{\tilde{A}}$ из предыдущей теоремы и так называемой унитарной конгруэнц-теоремы следует, что изучение группы $A^* / \Sigma'(A, \tau)$ эквивалентно изучению группы $U_A / (\Sigma'(A, \tau) \cap U_A)$, где U_A – группа обратимых элементов кольца нормирования O_A алгебры A .

Дальнейшее описание этой и подобных групп тесно связано с результатами работы [5], поскольку имеет место точная последовательность

$$1 \rightarrow \Sigma'(A, \tau) \subset A^* \rightarrow A^* / \Sigma'(A, \tau) \rightarrow 1.$$

В случае тел некоммутативных рациональных функций для получения нужного описания необходимо использовать глубокую связь между алгебрами с инволюциями над гензелевыми полями и аналогичными алгебрами, являющимися телами некоммутативных рациональных функций (более общо, градуированными алгебрами). Кроме того, используется метод вычисления приведенных норм в функциональных полях, указанный в [4].

Переходя к рассмотрению проблемы цикличности алгебр, упомянутых в (i), сформулируем следующую задачу, идейно примыкающую к этой проблеме. Пусть N – неразветвленное расширение K и e – натуральное число, взаимно простое с p . Существует ли вполне разветвленное расширение Z над N , циклическое над K ?

Замечание 3. Решение этой задачи, по-видимому, известно специалистам и помещено здесь, во-первых, с целью возможного использования для получения общего критерия цикличности и, во-вторых, для удобства читателя.

Теорема 4. Пусть K – гензелево дискретно нормированное поле, и натуральное число $e > 1$ взаимно просто с характеристикой совершенного поля вычетов \bar{K} . Тогда циклическое слабо разветвленное расширение Z/K степени pe и индекса ветвления e с полем вычетов \bar{N} существует в том и только в том случае, когда поле \bar{N} циклично над \bar{K} , $n = [\bar{N} : \bar{K}]$ и в поле \bar{N} найдется элемент q со свойством $N_{\bar{N}/\bar{K}}(q) = \varepsilon_e$, где $\varepsilon_e \in \bar{K}$ – примитивный корень степени e из 1.

Доказательство. Предположим, что расширение Z/K , указанное в формулировке теоремы, существует, и пусть N – максимальное не разветвленное над K подполе поля Z . Тогда поле вычетов \bar{Z} поля Z/\bar{K} изоморфно полю \bar{N} , и, следовательно, расширение \bar{N} над \bar{K} циклическое. Ввиду условия взаимной простоты e и характеристики \bar{K} , $Z = N(\sqrt[e]{a})$ для подходящего простого элемента $a \in N$. Обозначим через σ образующую группы Галуа $\text{Gal}(N/K)$, а через $\tilde{\sigma} \in \text{Gal}(N/K)$ с ограничением σ на поле N . Тогда a^σ – простой элемент в N . Положим $\alpha = \sqrt[e]{a}$. Получим, что $\alpha^{\tilde{\sigma}} = \sqrt[e]{a^\sigma}$. Так как $N^{\tilde{\sigma}} = N$, то $Z = (N(\sqrt[e]{a}))^{\tilde{\sigma}} = N(\sqrt[e]{a^\sigma})$. Из предыдущего немедленно следует $a^\sigma = a^t v^e$, где t – число взаимно простое с e ($0 < t < e$), $v \in N$. Поскольку a и a^σ – простые элементы, то $t = 1$ и потому v – единица в N (т. е. обратимый элемент в кольце нормирования поля N). Положим $\beta = \sqrt[e]{a^\sigma}$. Заметим, что $\beta = \sqrt[e]{a^\sigma} = \sqrt[e]{a v^e} = \sqrt[e]{a} v = \alpha v$. Пусть φ – автоморфизм поля Z , $\langle \varphi \rangle = \text{Gal}(Z/K)$, следовательно, порядок равен pe . Можно считать, что $\varphi|_N = \sigma^i$, то можно перейти к подходящей степени φ . Автоморфизм φ переводит корень многочлена $x^e - a$ в корень многочлена $x^e - a^\sigma$, т. е. $\alpha^\varphi = \varepsilon_e^j \alpha v$. Но $\varepsilon_e \in N$, поэтому, не ограничивая общности, можно считать, что $\alpha^\varphi = \alpha u$, где $u \in N$. Тогда $\alpha^{\varphi^2} = (\alpha u)^\varphi = u^\sigma \alpha$, $\alpha^{\varphi^n} = u^{\sigma^{n-1}} \dots u^\sigma \alpha = N_{N/K}(u) \alpha$ и $\alpha^{\varphi^{nr}} = N_{N/K}(u)^r \alpha$, что влечет при $r = e$ $N_{N/K}(u)^e = 1$. С другой стороны, при $0 < r < e$ $N_{N/K}(u)^r \neq 1$, и, стало быть, $N_{N/K}(u)$ – примитивный корень степени e из 1. Что касается неравенства $N_{N/K}(u)^r \neq 1$ при $0 < r < e$,

то оно немедленно следует из того, что α — примитивный элемент расширения Z/K (если бы $Z \neq K(\alpha)$, то это бы противоречило цикличности расширения $Z/K(\alpha^e)$). Переходя в равенстве $N_{N/K}(u)^e = 1$ к вычтам и пользуясь слабой разветвленностью Z/K , получаем для $q = \bar{u} \in N_{N/K}(q)$ — примитивный корень степени e из 1 в \bar{K} .

Обратно, пусть \tilde{N}/\bar{K} — циклическое расширение степени n и в \tilde{N} существует элемент q такой, что $N_{\tilde{N}/\bar{K}}(q) = \varepsilon_e$, где $\varepsilon_e \in \bar{K}$ — примитивный корень степени e из 1. Обозначим через N неразветвленное расширение K с полем вычетов \tilde{N} . Тогда в N найдется такой элемент u , что $N_{N/K}(u)$ — примитивный корень степени e из 1 в K , вычет которого совпадает с ε_e . Пусть σ — образующая группы Галуа $\text{Gal}(N/K)$. Тогда существует элемент a такой, что $a^\sigma/a = u^e$, т. е. $a^\sigma = au^e$, и расширение $N(\sqrt[e]{a})/K$ является расширением Галуа. Пусть $\alpha = \sqrt[e]{a}$, $\beta = \alpha v$. Покажем, что гомоморфизм φ , переводящий всякий элемент $f(\alpha)$ в $f^\sigma(\alpha v)$, имеет порядок ne , где $f(x) \in N[x]$, и $\varphi|_N = \sigma$. Пусть $\varphi^i = \text{id}_N(\sqrt[e]{a})$. Следовательно, n — делитель i , поэтому $i = rn$. Далее, $\alpha^{e^{rn}} = N_{N/K}(u)^r \alpha = \varepsilon_e^r \alpha$, откуда заключаем, что $r = e$, т. е. порядок φ равен ne , и расширение $N(\sqrt[e]{a})/K$ циклическое, что и требовалось.

Перейдем к задаче цикличности алгебр над полями из (i).

Теорема 5. Пусть A — k -алгебра из (i). Тогда A циклична, если выполнено одно из следующих условий:

- 1) A не разветвлена над k ;
- 2) индекс ветвления $e(A/k)$ совпадает с индексом алгебры A ;
- 3) пусть $1 \leq e(A/k) < n$, где n — индекс A , и центр Z алгебры вычетов — неразветвленное расширение поля \bar{k} (относительно p -адического нормирования k).

Доказательство. Нетрудно видеть, что при доказательстве теоремы достаточно ограничиться случаем алгебр примарного индекса. Заметим, что поле k является полем формальных степенных рядов над подходящим числовым локальным полем (конечным расширением поля p -адических чисел). Рассмотрим последовательно возможные случаи ветвления для k -алгебры A .

1) A не разветвлена над k . Тогда алгебра вычетов \bar{A} — центральная \bar{k} -алгебра с делением и \bar{k} — числовое локальное поле. Пусть \bar{Z}/\bar{k} — максимальное неразветвленное подполе в \bar{A} , и \bar{Z}/\bar{k} — его максимальный неразветвленный подъем в A , что влечет цикличность A .

2) В этом случае алгебра вычетов \bar{A} является циклическим расширением поля \bar{k} . Рассмотрев неразветвленный подъем \bar{A}/\bar{k} , приходим к заключению о цикличности алгебры A .

В случае 3) рассмотрим максимальное неразветвленное расширение E/Z алгебры вычетов \bar{A} . Ясно, что E/\bar{k} — неразветвленное расширение степени n , а потому циклично, и циклическим его неразветвленный подъем в A . Следовательно, алгебра A циклична, что и требовалось.

Из теоремы немедленно вытекает

Следствие 2. Пусть алгебра A такая же, как в формулировке теоремы 5, и имеет бесквадратный индекс. Тогда A циклична.

Доказательство. Ясно, что алгебру A можно считать имеющую простой индекс, а тогда для A имеет место либо случай 1), либо случай 2).

Список использованной литературы

1. Draxl, P. SK_1 von Schiefkörpern / P. Draxl, M. Kneiser // Lectures Notes Math. — 1977. — Vol. 778. — P. 1–124.
2. Merkurjev, A. S. Suslin's conjecture on the reduced Whitehead group of a simple algebras / A. S. Merkurjev // J. Amer. Math. Soc. Published electronically. — 2015. — November 17.
3. Saltman, D. Cyclic algebras over p -adic curves / D. Saltman // J. Algebra. — 2007. — Vol. 314. — P. 817–843.
4. Янчевский, В. И. Приведенные нормы простых алгебр над функциональными полями / В. И. Янчевский // Тр. МИАН СССР. — 1990. — Т. 183. — С. 215–222.
5. Янчевский, В. И. Приведенная унитарная K -теория и тела над гензелевыми дискретно нормированными полями / В. И. Янчевский // Изв. АН СССР. Сер. математика. — 1978. — Т. 42, № 4. — С. 879–918.
6. Yanchevskii, V. I. Reduced unitary Whitehead groups of skew fields of noncommutative rational functions / V. I. Yanchevskii // J. of Sov. Mathematics. — 1982. — Vol. 19, iss. 1. — P. 1067–1071.

Поступила в редакцию 15.03.2016

УДК 519.2

Ю. С. ХАРИН, В. Ю. ПАЛУХА

СТАТИСТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ ЭНТРОПИИ РЕНЬИ И ТСАЛЛИСА И ИХ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДЛЯ ПРОВЕРКИ ГИПОТЕЗ О «ЧИСТОЙ СЛУЧАЙНОСТИ»

*НИИ прикладных проблем математики и информатики
Белорусского государственного университета, Минск, Беларусь,
kharin@bsu.by, palukha@bsu.by*

Предложен подход к построению состоятельных статистических оценок функционалов энтропии Реньи и Тсаллиса. Найдено асимптотическое распределение вероятностей построенных точечных оценок, построены интервальные оценки. На основе интервальных оценок разработано решающее правило для статистической проверки гипотез о «чистой случайности» наблюдаемой дискретной последовательности. Представлены результаты компьютерных экспериментов.

Ключевые слова: функционалы энтропии Реньи и Тсаллиса, асимптотически нормальное распределение вероятностей, точечные и интервальные статистические оценки, проверка гипотез.

Yu. S. KHARIN, U. Yu. PALUKHA

STATISTICAL ESTIMATORS OF RENYI AND TSALLIS ENTROPY AND THEIR USE FOR TESTING THE HYPOTHESES OF “PURE RANDOMNESS”

*Research Institute for Applied Mathematics and Informatics of Belarusian State University, Minsk, Belarus,
kharin@bsu.by; palukha@bsu.by*

An approach to the construction of consistent statistical estimators for Renyi and Tsallis entropy is considered. The asymptotic probability distribution of constructed point estimators is proved, and the interval estimators are constructed. On the basis of interval estimators the decision rule for the statistical testing of the hypotheses of “pure randomness” of the observed discrete sequence is developed. The results of computer experiments are presented.

Keywords: Renyi and Tsallis entropy, asymptotically normal probability distribution, statistical estimators, testing of hypotheses.

Введение. В теории информации наряду с энтропией Шеннона известны и другие функционалы информационной энтропии, которые оказываются полезными в ряде прикладных задач [1]. В криптологии и других приложениях часто возникает задача статистического оценивания энтропии, при этом необходимо знание вероятностных свойств построенных оценок. Общепринятым подходом к статистическому оцениванию энтропии является построение частотных оценок вероятностей элементов алфавита и подстановка полученных оценок в функционал энтропии вместо истинных значений вероятностей.

Пусть на вероятностном пространстве (Ω, F, P) с множеством состояний $\Omega = \{\omega_1, \dots, \omega_N\}$ определена случайная величина $x = x(\omega) = \omega$ с дискретным распределением вероятностей $p_k = P\{x = \omega_k\}$, $p_k \geq 0$, $\sum_{k=1}^N p_k = 1$, $k = 1, \dots, N$. Определим функционал обобщенной энтропии согласно [1]:

$$H_{h,w}^{\varphi_1, \varphi_2}(P) = h \left(\frac{\sum_{k=1}^N w_k \varphi_1(p_k)}{\sum_{k=1}^N w_k \varphi_2(p_k)} \right), \quad (1)$$

где $w_k > 0$, $k = 1, \dots, N$ – вес состояния ω_k , $\varphi_1 : [0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$, $\varphi_2 : [0, 1) \rightarrow \mathbb{R}$, $h : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, – заданные функции.

В таблице приведены наиболее часто используемые [1] частные случаи функционала обобщенной энтропии (1), определяемые заданием функций $h(\cdot)$, $\varphi_1(\cdot)$, $\varphi_2(\cdot)$, $\{w_k\}$, входящих в (1).

Основные функционалы энтропии

Тип	Формула	$h(x)$	$\varphi_1(x)$	$\varphi_2(x)$	w_k
Энтропия Шеннона	$H(P) = -\sum_{k=1}^N p_k \ln p_k$	x	$-x \ln x$	x	$w \equiv 1$
Энтропия Реньи	$H_r(P) = \frac{1}{1-r} \ln \left(\sum_{k=1}^N p_k^r \right)$	$(1-r)^{-1} \ln x$	x^r	x	$w \equiv 1$
Энтропия Тсаллиса	$S_r(P) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \sum_{k=1}^N p_k^r \right)$	$(1-r)^{-1}(x-1)$	x^r	x	$w \equiv 1$

Задача построения статистической оценки энтропии Шеннона $H(p)$ рассмотрена в работах [2, 3]. В [2] изучено поведение математического ожидания оценки энтропии при различных способах построения частотных оценок вероятностей $\{p_k\}$. В [3] рассмотрено применение статистической оценки энтропии Шеннона для проверки гипотез о вероятностных свойствах наблюдаемой двоичной последовательности.

В последнее время внимание исследователей привлекают также функционалы энтропии Реньи $H_r(p)$ и Тсаллиса $S_r(p)$, изучаются методы построения статистических оценок этих функционалов. В [4] найдена оптимальная длина последовательности для построения оценки энтропии Реньи в зависимости от N и r , статья [5] посвящена построению оценок энтропии Шеннона, Реньи и Тсаллиса, сбалансированных по принципу «смещение – дисперсия». Стоит отметить, что функционал энтропии Шеннона является предельным значением функционалов Реньи и Тсаллиса при $r \rightarrow 1$ [5] и отличается от них наличием некоторых дополнительных свойств (например, аддитивности [6]).

В данной статье предлагается метод построения статистических оценок энтропии Реньи и Тсаллиса и доказываются вероятностные свойства полученных оценок. Построенные по реализации случайной последовательности оценки предлагается применять для статистической проверки гипотез о близости наблюдаемой последовательности к «чисто случайной» последовательности (т. е. равномерно распределенной случайной последовательности, далее – РПСП), что является актуальной задачей в приложениях, связанных с защитой информации, анализом генетических последовательностей [6].

Построение статистических оценок энтропии на основе частотных оценок вероятностей.

Пусть имеется случайная последовательность $\{x_t : t = 1, \dots, n\}$ объема n из распределения вероятностей $\{p_k\}$. Построим частотные оценки распределения вероятностей $\{p_k : k = 1, \dots, N\}$:

$$\hat{p}_k = \frac{v_k}{n}, \quad v_k = \sum_{t=1}^n I\{x_t = \omega_k\}, \quad I\{x_t = \omega_k\} = \begin{cases} 1, & x_t = \omega_k; \\ 0, & x_t \neq \omega_k. \end{cases} \quad (2)$$

Введем в рассмотрение гипотезу $H_* = \{\{x_t\} \text{ является РПСП}\} = \{\{x_t\} - \text{н.о.р.с.в., } p_k = 1/N, k = 1, \dots, N\}$ и альтернативу \overline{H}_* .

Следуя [7], будем полагать, что имеет место схема серий. В таком случае вектор $(v_1, \dots, v_N)^T$, составленный из частот v_k из (2), имеет полиномиальное распределение вероятностей $\text{Pol}(n, N, p_1, \dots, p_N)$, а каждая из компонент распределена по биномиальному закону $Bi(n, p_k)$. Рассмотрим асимптотику:

$$n, N \rightarrow \infty, n/N \rightarrow \lambda, 0 < \lambda < \infty, \quad (3)$$

которая отличается от классической ($n \rightarrow \infty, N < \infty$) тем, что длительность наблюдения n и число значений N растут синхронно. В асимптотике (3) для распределения вероятностей статистик $\{v_k\}$

справедлива аппроксимация законом Пуассона $\Pi(\lambda_k)$ с параметром $\lambda_k = np_k$ [8]. При истинной гипотезе H_* все элементарные вероятности равны: $p_k = 1/N$, $k = 1, \dots, N$, поэтому все частоты $\{v_k\}$ имеют одинаковый параметр распределения Пуассона $\lambda = n/N$.

Рассмотрим подробнее функционалы энтропии Реньи и Тсаллиса с параметром $r \in \{2, 3, \dots\}$. Как видно из таблицы, функционалы объединяет общая функция $\varphi_1(x) = x^r$. Аргументом функции является вероятность p_k . Видно также, что энтропии Реньи и Тсаллиса – функции от величины

$$P_r(P) = \sum_{k=1}^N p_k^r. \quad (4)$$

Следовательно, возникает задача статистического оценивания величины $P_r(P)$.

Известно [4], что статистическая оценка для (4) по подстановочному принципу $\widehat{P}_r(P) = \sum_{k=1}^N \widehat{p}_k^r = \sum_{k=1}^N \left(\frac{v_k}{n}\right)^r$ является смещенной. Для построения асимптотически несмещенной оценки определим r -ю нисходящую факториальную степень x :

$$x^{\underline{r}} = x(x-1)\dots(x-r+1) = \frac{x!}{(x-r)!} = \sum_{i=0}^r s(r,i)x^i, \quad (5)$$

где $s(r, i)$ – число Стирлинга первого рода [9]; по определению, при $x < r$ полагают $x^{\underline{r}} := 0$. В [4] предложена статистическая оценка для величины (4), которая основана на (5):

$$\widetilde{P}_r(P) = \sum_{k=1}^N \frac{v_k^{\underline{r}}}{n^r}. \quad (6)$$

Согласно [4], эта оценка (6) в асимптотике (3) удовлетворяет следующим асимптотическим свойствам:

$$E\{\widetilde{P}_r(P)\} \rightarrow P_r(P), \quad (7)$$

$$D\{\widetilde{P}_r(P)\} \rightarrow 0, \quad (8)$$

которые влекут асимптотическую несмещенность и состоятельность оценки (6) [10].

Положим

$$f_r(v) = v^{\underline{r}}, \quad (9)$$

$$Z_{n,r} = \sum_{k=1}^N f_r(v_k) = \sum_{k=1}^N v_k^{\underline{r}} = n^r \widetilde{P}_r(P). \quad (10)$$

Из [7] следует, что в асимптотике (3) при выполнении некоторых условий регулярности, которые мы сформулируем и проверим в дальнейшем, статистика (10) имеет асимптотически нормальное распределение:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{Z_{n,r} - \mu_{n,r}}{\sigma_{n,r}}\right\} \rightarrow \mathcal{N}_1(0,1), \quad (11)$$

$$\mu_{n,r} = \sum_{k=1}^N E\{v_k^{\underline{r}}\},$$

$$\sigma_{n,r}^2 = \sum_{k=1}^N D\{v_k^r\} - \left(\sum_{k=1}^N \text{cov}\{v_k, v_k^r\} \right)^2 / n, \quad (12)$$

где $\mathcal{N}_1(0,1)$ – стандартный одномерный нормальный закон распределения вероятностей с нулевым математическим ожиданием и единичной дисперсией, $E\{\xi\}$ и $D\{\xi\}$ – соответственно математическое ожидание и дисперсия случайной величины ξ , $\text{cov}\{\xi, \eta\}$ – ковариация случайных величин ξ и η .

Для нахождения параметров распределения вероятностей статистики (10) необходимо вычислить моменты $E\{v_k^r\}$ и $D\{v_k^r\}$. Для удобства опустим индекс k у величины v_k . Полагая, что случайная величина v распределена по закону Пуассона с параметром λ , т. е. $\mathcal{L}\{v\} = \Pi(\lambda)$, получим, согласно [4],

$$E\{v^r\} = \lambda^r. \quad (13)$$

Кроме того, согласно [11],

$$E\{v^r\} = \sum_{i=0}^r S(r, i) \lambda^i, \quad (14)$$

где $S(r, i)$ – число Стирлинга второго рода [9], а сумма в правой части этого равенства является многочленом Тоучарда. Приведем несколько свойств чисел Стирлинга, которые нам понадобятся в дальнейшем:

$$S(r, 0) = s(r, 0) = 0, \forall r \in \mathbb{N}; \quad S(0, 0) = s(0, 0) = 1; \quad (15)$$

$$S(r, 1) = S(r, r) = s(r, r) = 1, \forall r \in \mathbb{N}. \quad (16)$$

Л е м м а 1. Пусть $\mathcal{L}\{v\} = \Pi(\lambda)$, тогда

$$D\{v^r\} = \lambda^r (E\{(v+r)^r\} - \lambda^r) = \lambda^r E\{(v+r)^r - v^r\}. \quad (17)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для математического ожидания квадрата статистики (10) справедлива формула [4]:

$$E\{(v^r)^2\} = \lambda^r E\{(v+r)^r\}. \quad (18)$$

Из свойства дисперсии $D\{v^r\} = E\{(v^r)^2\} - E^2\{v^r\}$, (13) и (18) вытекает

$$D\{v^r\} = \lambda^r E\{(v+r)^r\} - \lambda^{2r} = \lambda^r (E\{(v+r)^r\} - \lambda^r) = \lambda^r E\{(v+r)^r - v^r\},$$

что завершает доказательство леммы 1.

Л е м м а 2. Пусть $\mathcal{L}\{v\} = \Pi(\lambda)$, тогда

$$\text{cov}\{v, v^r\} = r\lambda^r. \quad (19)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для математического ожидания произведения v и v^r справедливо

$$\begin{aligned} E\{v v^r\} &= \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{i!} i i^r = \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{i!} i \frac{i!}{(i-r)!} = \sum_{i=r}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{(i-r)!} i = \lambda^r \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{i!} (i+r) = \\ &= \lambda^r \left(\sum_{i=0}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{i!} i + r \sum_{i=0}^{+\infty} \frac{e^{-\lambda} \lambda^i}{i!} \right) = \lambda^r (\lambda + r). \end{aligned} \quad (20)$$

Из (13), (20), свойств ковариации и распределения Пуассона имеем

$$\text{cov}\{v, v^L\} = E\{v v^L\} - E\{v\}E\{v^L\} = \lambda^r(\lambda + r) - \lambda\lambda^r = r\lambda^r,$$

что и требовалось доказать.

Вернемся к рассмотрению вероятностных свойств статистики (10). При истинной гипотезе H_* соотношения (11) и (12) преобразуются соответственно в

$$\mu_{n,r} = \sum_{k=1}^N E\{v_k^r\} = NE\{v^r\}, \quad (21)$$

$$\sigma_{n,r}^2 = ND\{v^L\} - N^2 \text{cov}^2\{v, v^L\}/n = N(D\{v^L\} - \text{cov}^2\{v, v^L\}/\lambda). \quad (22)$$

Т е о р е м а 1. При истинной гипотезе H_* в асимптотике (3) статистика (10) имеет асимптотически нормальное распределение:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{Z_{n,r} - \mu_{n,r}}{\sigma_{n,r}}\right\} \rightarrow \mathcal{N}_1(0,1),$$

$$\mu_{n,r} = N\lambda^r = n\lambda^{r-1}, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{n,r}^2 &= N\lambda^r \left(\sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=0}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k - r^2 \lambda^{r-1} + r! \right) = \\ &= n\lambda^{r-1} \left(\sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=0}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k - r^2 \lambda^{r-1} + r! \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Сначала проверим выполнение условий теоремы 1 из [7].

1. $n, N \rightarrow \infty, n/N \rightarrow \lambda, 0 < \lambda < \infty$ – это выполнено в силу условия теоремы.
2. $Np_k \leq C < \infty, \forall N, k$. Поскольку $p_k = 1/N, k = 1, \dots, N$, то $Np_k \equiv 1$.
3. $|f(v)| \leq a \exp(bv)$. Поскольку (9) неотрицательна, то $|f(v)| = f(v) = v^L$. Положим в условии $a = 1, b = r$ и рассмотрим отдельно два случая: $v = 0$ и $v \geq 1$. При $v = 0$ неравенство выполняется: $0 < 1$. Для $v \geq 1$ справедлива цепочка утверждений: $\ln v < v \Rightarrow r \ln v < rv \Leftrightarrow \ln v^r < rv \Rightarrow v^r < e^{rv}$. Поскольку $v^L \leq v^r$, то получаем $v^L < e^{rv}$, что ведет к выполнению указанного условия.

4. $\limsup_{n \rightarrow \infty} \sigma_{n,r}^2/n < \infty$. Из второй формулы в (24) следует, что $\sigma_{n,r}^2/n$ является многочленом от λ степени $2r - 3$, и значение этой величины конечно в силу того, что $\lambda < \infty$.

Подставив (13) в (21), получим (23). Для нахождения асимптотической дисперсии (24) проведем вспомогательные преобразования, воспользовавшись (13) и (14):

$$\begin{aligned} E\{(v+r)^L\} - \lambda^r &= E\{(v+r)^L - v^L\} = E\left\{ \sum_{i=1}^r s(r,i)(v+r)^i - \sum_{i=1}^r s(r,i)v^i \right\} = \\ &= \sum_{i=1}^r s(r,i)E\{(v+r)^i - v^i\} = \sum_{i=1}^r s(r,i)E\left\{ \sum_{j=0}^i C_i^j v^j r^{i-j} - v^i \right\} = \\ &= \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=0}^{i-1} C_i^j r^{i-j} E\{v^j\} = \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=0}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=0}^j S(j,k) \lambda^k. \end{aligned} \quad (25)$$

Применив (5) и (15), получим

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=0}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=0}^j S(j,k) \lambda^k &= \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + \sum_{i=1}^r s(r,i) C_i^0 r^i = \\ &= \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + r^L = \sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + r!. \end{aligned} \quad (26)$$

Подставив (17) и (19) в (22) с учетом (25) и (26), приходим к (24):

$$\begin{aligned}\sigma_{n,r}^2 &= N \left(\left(\sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + r! \right) \lambda^r - r^2 \lambda^{2r-1} \right) = \\ &= N \lambda^r \left(\sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + r! - r^2 \lambda^{r-1} \right),\end{aligned}$$

что завершает доказательство теоремы 1.

Заметим, что в (25) имеется единственный одночлен λ^{r-1} при $i=r, j=i-1, k=j$. Согласно (16), коэффициент при этом одночлене равен $s(r,r) C_r^{r-1} r^{r-r+1} S(r-1, r-1) = r^2$. Поэтому (24) можно представить в эквивалентном виде

$$\sigma_{n,r}^2 = N \lambda^r \left(\sum_{i=1}^{r-1} s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + \sum_{j=1}^{r-2} C_r^j r^{r-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k + r^2 \sum_{k=1}^{r-2} S(r-1, k) \lambda^k + r! \right). \quad (27)$$

С л е д с т в и е 1. При $r=2$ для параметров асимптотически нормального распределения вероятностей случайной величины $Z_{n,2}$ справедливы выражения

$$\mu_{n,2} = n\lambda, \quad (28)$$

$$\sigma_{n,2}^2 = 2n\lambda. \quad (29)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Справедливость (28) очевидно вытекает из (23) при $r=2$. Вычислим дисперсию при $r=2$, опираясь на (27):

$$\sigma_{n,2}^2 = N \lambda^2 \cdot 2! = 2n\lambda,$$

что и требовалось доказать.

Согласно таблице и (10), статистические оценки энтропии Реньи и Тсаллиса выражаются через $Z_{n,r}$, о чем свидетельствует следующая лемма.

Л е м м а 3. Статистические оценки энтропии Реньи и Тсаллиса, построенные с использованием оценки (6), выражаются через статистику (10):

$$\widehat{H}_r(n, N) = \frac{1}{1-r} \ln \left(\sum_{k=1}^N \frac{v_k^r}{n^r} \right) = \ln n + \frac{1}{r-1} (\ln n - \ln Z_{n,r}), \quad (30)$$

$$\widehat{S}_r(n, N) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{v_k^r}{n^r} \right) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{Z_{n,r}}{n^r} \right). \quad (31)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. В силу (10) и таблицы для оценки энтропии Реньи справедливо представление

$$\widehat{H}_r(n, N) = \frac{1}{1-r} \ln \left(\sum_{k=1}^N \frac{v_k^r}{n^r} \right) = \frac{1}{1-r} \left(\ln \frac{1}{n^r} + \ln Z_{n,r} \right) = \frac{1}{r-1} (r \ln n - \ln Z_{n,r}) = \ln n + \frac{1}{r-1} (\ln n - \ln Z_{n,r}).$$

Для оценки энтропии Тсаллиса аналогично имеем:

$$\widehat{S}_r(n, N) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \sum_{k=1}^N \frac{v_k^r}{n^r} \right) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{1}{n^r} \sum_{k=1}^N v_k^r \right) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{Z_{n,r}}{n^r} \right).$$

Лемма 3 доказана.

Статистическая оценка энтропии Тсаллиса и ее свойства. Справедлива теорема об асимптотическом распределении вероятностей статистической оценки энтропии Тсаллиса.

Т е о р е м а 2. В асимптотике (3) статистика (31) является состоятельной асимптотически несмещенной оценкой энтропии Тсаллиса и при истинной гипотезе H_* имеет асимптотически нормальное распределение:

$$\mathcal{L}\left\{\frac{\widehat{S}_r - \mu_{S,r}}{\sigma_{S,r}}\right\} \rightarrow \mathcal{N}_1(0,1),$$

$$\mu_{S,r} = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{1}{N^{r-1}}\right), \quad (32)$$

$$\sigma_{S,r}^2 = \frac{\lambda^{r-1}}{(r-1)^2 n^{2r-1}} \left(\sum_{i=1}^r s(r,i) \sum_{j=1}^{i-1} C_i^j r^{i-j} \sum_{k=1}^j S(j,k) \lambda^k - r^2 \lambda^{r-1} + r! \right). \quad (33)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Асимптотическая несмещенность и состоятельность оценки (31) следует из (4), (7), (8), (10), (31) и таблицы.

Далее, как видно из формулы (31), статистическая оценка энтропии Тсаллиса является линейным преобразованием статистики (10), поэтому с учетом теоремы о линейном преобразовании нормально распределенной случайной величины [8] она также имеет асимптотически нормальное распределение. Для математического ожидания оценки (31) с учетом (3), (23) справедливо равенство

$$E\{\widehat{S}_r\} = E\left\{\frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{Z_{n,r}}{n^r}\right)\right\} = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{E\{Z_{n,r}\}}{n^r}\right) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{N\lambda^r}{n^r}\right) = \frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{1}{N^{r-1}}\right).$$

Для дисперсии оценки (31) имеем

$$D\{\widehat{S}_r\} = D\left\{\frac{1}{r-1} \left(1 - \frac{Z_{n,r}}{n^r}\right)\right\} = D\left\{\frac{Z_{n,r}}{(r-1)n^r}\right\} = \frac{D\{Z_{n,r}\}}{(r-1)^2 n^{2r}}, \quad (34)$$

откуда с учетом (24) получаем (33). Теорема 2 доказана.

С л е д с т в и е 2. При $r = 2$ для математического ожидания и дисперсии асимптотического распределения оценки (31) справедливы выражения:

$$\mu_{S,2} = 1 - \frac{1}{N}, \quad (35)$$

$$\sigma_{S,2}^2 = \frac{2}{Nn^2}. \quad (36)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Соотношение (35) следует из (32). Подставим (29) в (34), получим

$$D\{\widehat{S}_2\} = \frac{2n\lambda}{n^4} = \frac{2\lambda}{n^3} = \frac{2}{Nn^2},$$

что совпадает с (36).

Знание асимптотического распределения вероятностей точечной состоятельной оценки (31) позволяет построить интервальную оценку энтропии Тсаллиса:

$$\text{с вероятностью } 1 - \varepsilon \text{ энтропия } S_r(P) \in (S_-, S_+), \quad S_{\pm} = \mu_{S,r} \pm \sigma_{S,r} \Phi^{-1}\left(1 - \frac{\varepsilon}{2}\right),$$

где $\Phi^{-1}(\cdot)$ – квантиль стандартного нормального закона [8].

Статистическая оценка энтропии Реньи и ее свойства. Справедлива следующая теорема об асимптотическом распределении вероятностей статистической оценки энтропии Реньи.

Теорема 3. *В асимптотике (3) статистика (30) является состоятельной оценкой энтропии Тсаллиса и при истинной гипотезе H_* имеет асимптотически нормальное распределение:*

$$\mathcal{L} \left\{ \frac{\widehat{H}_r - \mu_{H,r}}{\sigma_{H,r}} \right\} \rightarrow \mathcal{N}_1(0,1),$$

$$\mu_{H,r} = \ln N, \quad (37)$$

$$\sigma_{H,r}^2 = \frac{\sigma_{n,r}^2}{(r-1)^2 n^2 \lambda^{2r-2}}, \quad (38)$$

$\sigma_{n,r}^2$ – дисперсия величины (8).

Доказательство. Состоятельность оценки (30) следует из (4), (7), (8), (10), (30), таблицы и теоремы о функциональном преобразовании сходящейся по вероятности случайной последовательности [12].

Далее, из (30) следует, что оценка энтропии Реньи является линейным преобразованием логарифма статистики (10). Воспользуемся теоремой 4.2.5 из [13] и тем, что линейное преобразование асимптотически нормальной величины [8] также имеет асимптотически нормальное распределение. В качестве функции $f(u)$ в теореме 4.2.5 из [13] выберем $f(u) = \ln u$. Тогда $(f'(u))^2 = \frac{1}{u^2}$, откуда с учетом (23), вида формулы (30) и свойств дисперсии вытекает справедливость формулы (38).

Также из теоремы 4.2.5 из [13] и формулы (30) с учетом (23) следует

$$\begin{aligned} \mu_{H,r} &= \ln n + \frac{1}{r-1} (\ln n - \ln \mu_{n,r}) = \ln n + \frac{1}{r-1} (\ln n - \ln n \lambda^{r-1}) = \\ &= \ln n + \frac{1}{r-1} (\ln n - \ln n - (r-1) \ln \lambda) = \ln n - \ln \lambda = \ln N, \end{aligned}$$

что завершает доказательство теоремы 3.

Следствие 3. *При $r = 2$ для дисперсии асимптотического распределения вероятностей оценки (30) справедливо выражение:*

$$\sigma_{H,2}^2 = \frac{2}{n\lambda}. \quad (39)$$

Доказательство. Подставим (29) в (38), получим доказываемое: $\sigma_{H,2}^2 = \frac{2n\lambda}{n^2\lambda^2} = \frac{2}{n\lambda}$.

Отметим, что при истинной гипотезе H_* $p_k = 1/N, k = 1, \dots, N$, поэтому значение энтропии Реньи равно

$$H_r(P) = \frac{1}{1-r} \ln \left(\sum_{k=1}^N p_k^r \right) = \frac{1}{1-r} \ln \left(\sum_{k=1}^N \frac{1}{N^r} \right) = \ln N,$$

что совпадает с (37).

Знание асимптотического распределения точечной состоятельной оценки (30) позволяет построить интервальную оценку энтропии Реньи:

$$\text{с вероятностью } 1 - \varepsilon \text{ энтропия } H_r(P) \in (H_-, H_+), \quad H_{\pm} = \mu_{H,r} \pm \sigma_{H,r} \Phi^{-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right).$$

Проверка гипотезы о «чистой случайности» последовательности на основе оценок энтропии Реньи и Тсаллиса. Полученные интервальные оценки позволяют построить решающее правило для проверки гипотез о том, является ли наблюдаемая последовательность генератора «чисто случайной», т. е. РРСП: H_* и \overline{H}_* . Пусть $\varepsilon \in (0, 1)$ – заданный уровень значимости. Введем обозначения: $\hat{h}_r(n, N)$ – статистическая оценка энтропии Тсаллиса (31) или Реньи (30), μ – асимптотическое математическое ожидание статистической оценки энтропии Тсаллиса (32) или Реньи (37), σ^2 – асимптотическая дисперсия статистической оценки энтропии Тсаллиса (33) или Реньи (38) при истинной гипотезе H_* . Вычислим для наблюдаемой последовательности статистику $\hat{h}_r(n, N)$. Решающее правило, основанное на статистике $\hat{h}_r(n, N)$, имеет вид

$$\begin{cases} H_*, & \text{если } t_- < \hat{h}_r(n, N) < t_+; \\ \overline{H}_*, & \text{в противном случае,} \end{cases} \quad t_{\pm} = \mu \pm \sigma \Phi^{-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right). \quad (40)$$

В случае принятия решения о справедливости гипотезы H_* можно сделать вывод о том, что на уровне значимости ε исследуемый процесс по своим энтропийным свойствам неотличим от «чисто случайной» последовательности на основе наблюдаемой реализации длиной не более n .

Результаты компьютерных экспериментов. В первом эксперименте для проверки разработанного решающего правила (40) в качестве выходной последовательности использовалась псевдослучайная последовательность $\{y_\tau\}$, $\tau = 1, \dots, T$, длиной $T = 2^{33}$ бит, полученная при помощи прореживающего генератора [6] с порождающим многочленом $x^{15} + x + 1$ и управляющим многочленом $x^{11} + x^2 + 1$. Выходная последовательность «нарезалась» на непересекающиеся подряд идущие фрагменты длины s (s -граммы): $X^{(t)} = (X_j^{(t)}) = (y_{(t-1)s+1}, \dots, y_{ts}) \in \{0, 1\}^s$, $t = 1, \dots, n = \lfloor T/s \rfloor$. Из полученных s -грамм формировалась новая последовательность $\{x_i\}$ из алфавита мощности $N = 2^s$ по правилу $x_i = \sum_{j=1}^s 2^{j-1} X_j^{(t)} + 1$. Длина фрагмента s принимала значения $s \in \{11, \dots, 30\}$. Значения отклонения Δ оценки энтропии Реньи (30) при $r = 2$ от математического ожидания (37) и отнормированные нижние границы доверительных интервалов $-\sigma_{H,2} \Phi^{-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right)$ на уровне значимости $\varepsilon = 0,05$ в зависимости от s представлены на рис. 1. Как видно, абсолютная величина

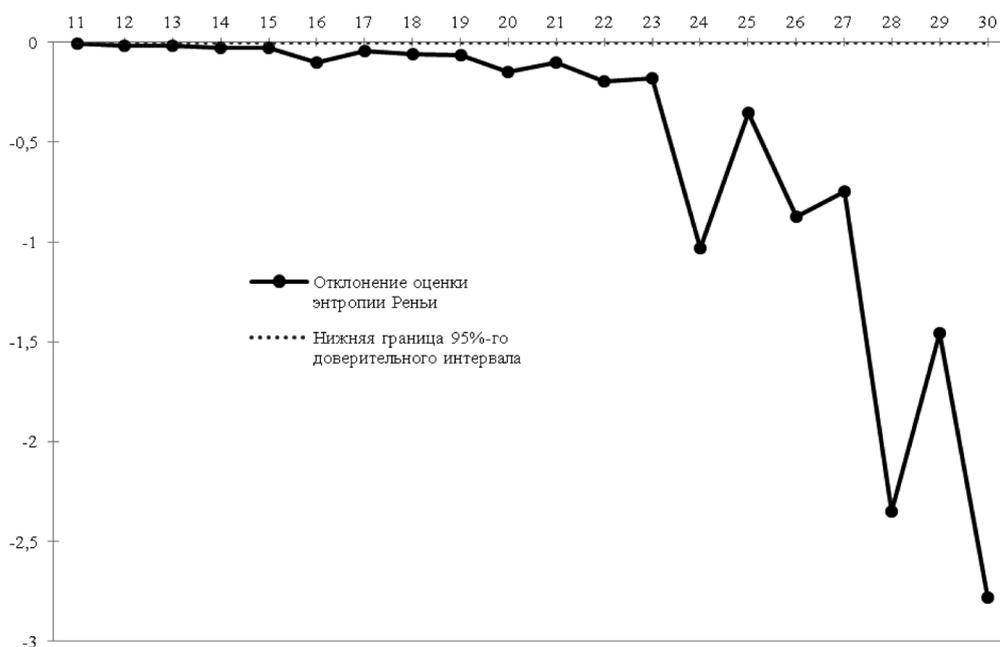


Рис. 1. Отклонение оценки энтропии Реньи от математического ожидания для $s \in \{11, \dots, 30\}$

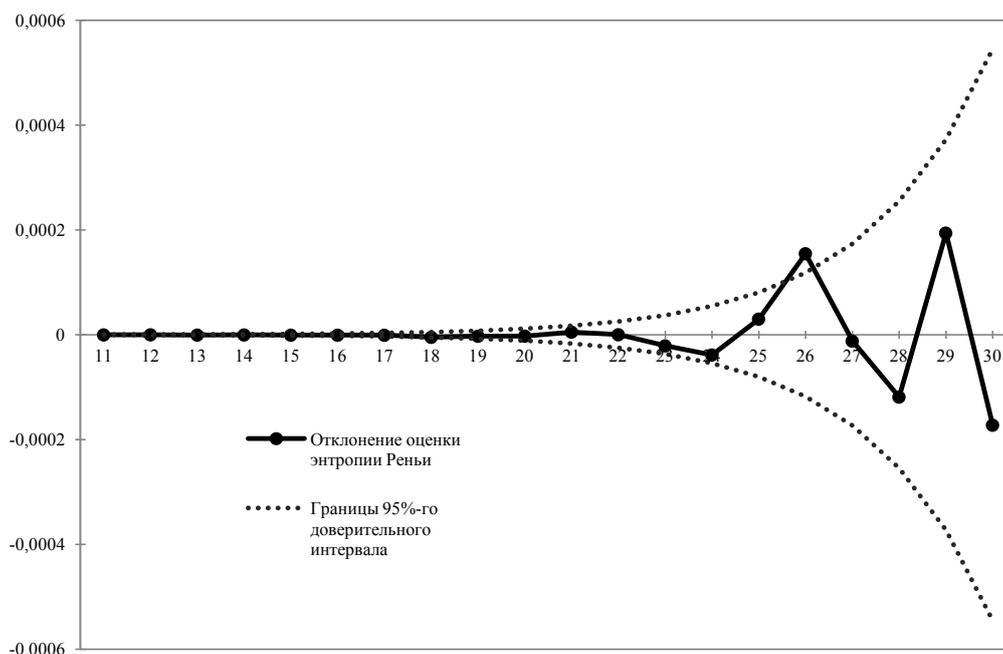


Рис. 2. Отклонение оценки энтропии Реньи от математического ожидания для $s \in \{11, \dots, 30\}$

отклонения оценки значительно превышает границу доверительного интервала и гипотеза H_* уверенно отвергается начиная с $s = 16$.

Во втором эксперименте разработанное решающее правило (40) применено для анализа выходной двоичной последовательности реального физического генератора двоичной случайной последовательности [14] $\{y_\tau\}$, $\tau = 1, \dots, T$, длиной $T = 125 \cdot 2^{25}$ бит. Новая последовательность $\{x_s\}$ из алфавита мощности $N = 2^s$ формировалась так же, как и в первом эксперименте. На рис. 2 представлены значения отклонения оценки энтропии Реньи (30) при $r = 2$ от математического ожидания (37), а также отнормированные границы доверительных интервалов $\pm \sigma_{H,2} \Phi^{-1} \left(1 - \frac{\varepsilon}{2} \right)$ на уровне значимости $\varepsilon = 0,1$ в зависимости от $s \in \{11, \dots, 30\}$. Как видно, при значениях $s \leq 25$ выходная последовательность генератора согласуется с моделью РРСП.

Заключение. Построены состоятельные, асимптотически нормально распределенные статистические оценки функционалов энтропии Реньи и Тсаллиса. Получены явные формулы для моментов построенных статистических оценок. Построено решающее правило, основанное на этих оценках, для проверки гипотезы о том, является ли наблюдаемая последовательность равномерно распределенной случайной последовательностью. Проведены компьютерные эксперименты, иллюстрирующие свойства построенных статистических оценок и решающих правил.

Список использованной литературы

1. Esteban, M. D. A summary on entropy statistics / M. D. Esteban, D. Morales // *Kybernetika*. – 1995. – Vol. 31, N 4. – P. 337–346.
2. Палуха, В. Ю. Энтропийные характеристики двоичных последовательностей в криптографии / В. Ю. Палуха, Ю. С. Харин // *Комплексная защита информации: материалы XX науч.-практ. конф.*, Минск, 19–21 мая 2015 г. – Минск: РИВШ, 2015. – С. 99–102.
3. Палуха, В. Ю. Вероятностные свойства оценки многомерной энтропии выходных последовательностей криптографических генераторов / В. Ю. Палуха, Ю. С. Харин // *Веб-программирование и Интернет-технологии WebConf-2015: Материалы 3-й Междунар. науч.-практ. конф.*, Минск, 12–14 мая 2015 г. – Минск: Изд. центр БГУ, 2015. – С. 146–147.
4. Estimating Renyi Entropy of Discrete Distributions [Electronic resource] / J. Acharya [et al.] – Mode of access: <http://arxiv.org/pdf/1408.1000v3.pdf>. – Date of access: 08.04.2016.

5. *Bonachela, J. A.* Entropy estimates of small data sets / J. A. Bonachela, H. Hinrichsen, M. A. Muñoz // *J. Phys. A: Mathematical and Theoretical*. – 2008. – Vol. 41, N 20. – 202001 (9 p).
6. Криптология / Ю. С. Харин [и др.]. – Минск: БГУ, 2013.
7. *Holst, L.* Asymptotic normality and efficiency for certain goodness-of-fit tests / L. Holst // *Biometrika*. – 1972. – N 59. – P. 137–145.
8. *Харин, Ю. С.* Теория вероятностей, математическая и прикладная статистика / Ю. С. Харин, Н. М. Зуев, Е. Е. Жук. – Минск: БГУ, 2011.
9. *Энвин, А. Ю.* Дискретная математика: конспект лекций / А. Ю. Энвин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998.
10. Математическая статистика: учеб. пособие / Моск. гос. ин-т электроники и математики; авт.-сост.: Н. Ю. Энатская, Е. Р. Хакимуллин. – Москва: МИЭМ, 2004. – Ч. 2.
11. *Riordan, J.* Moment recurrence relations for binomial, Poisson and hypergeometric frequency distributions / J. Riordan // *Annals of Mathematical Statistics*. – 1937. – Vol. 8, N 2. – P. 103–111.
12. *Боровков, А. А.* Теория вероятностей / А. А. Боровков. – М.: Эдиториал УРСС, 1999.
13. *Андерсон, Т.* Введение в многомерный статистический анализ / Т. Андерсон; пер. с англ. Ю. Ф. Кичатова, Е. С. Кочеткова, Н. С. Райбмана; под ред. Б. В. Гнеденко. – М.: Физматгиз, 1963.
14. speedtest-500MB.bin [Electronic resource] // Humboldt Berlin University, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, Department of Physics. – Mode of access: <http://qrng.physik.hu-berlin.de/files/speedtest-500MB.bin>. – Date of access: 08.04.2016.

Поступила в редакцию 26.05.2016

ФІЗІКА

УДК 539.12

О. В. ВЕКО¹, Я. А. ВОЙНОВА², Е. М. ОВСИЮК³ЧАСТИЦА СО СПИНОМ 1/2 И АНОМАЛЬНЫМ МАГНИТНЫМ МОМЕНТОМ
В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ¹Гимназия г. Калинковичи, Беларусь, e-mail: vekoolga@mail.ru²Средняя школа, Ельский район, Беларусь, e-mail: voinyuschka@mail.ru³Мозырский государственный педагогический университет им. И. П. Шамякина, Мозырь, Беларусь,
e-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

Исследовано уравнение Дирака для частицы со спином 1/2 и аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле. Задача приведена к дифференциальному уравнению второго порядка, в котором точки $x = 0, \infty$ являются нерегулярными особыми точками ранга 2, а в точке $x = 1$ имеется регулярная особенность. Описана общая структура решений уравнения, исследован характер зацепления коэффициентов в соответствующих степенных рядах. Выполнено ограничение к случаю электрически нейтральной частицы с аномальным магнитным моментом (нейтрон); задача сведена к более простому уравнению с двумя нерегулярными особыми точками $x = 0, \infty$ ранга 2 (дважды вырожденному уравнению Гойна). Качественный анализ уравнений показывает, что связанные состояния для нейтрона в кулоновском поле могут существовать только при одном знаке величины аномального магнитного момента.

Ключевые слова: электрон, нейтрон, аномальный магнитный момент, кулоновское поле, связанные состояния.

O. V. VEKO¹, Y. A. VOYNOVA², E. M. OVSIYUK³

SPIN 1/2 PARTICLE WITH ANOMALOUS MAGNETIC MOMENT IN THE COULOMB FIELD

¹Gymnasium, Kalinkovichi, Belarus, e-mail: vekoolga@mail.ru²Secondary School, Yelsk region, Belarus, e-mail: voinyuschka@mail.ru³Mozyr State Pedagogical University named after I. P. Shamyakin, Mozyr, Belarus,
e-mail: e.ovsiyuk@mail.ru

The Dirac equation for a spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment in the applied Coulomb field is studied. The problem reduces to a second-order differential equation, in which the points $x = 0, \infty$ are the irregular singular points of rank 2, and at the point $x = 1$ there is the regular singularity. The general structure of possible solutions of the equation is described, and the recurrent formulas for coefficients of relevant power series are derived. The case of an electrically neutral spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment (neutron) is specified in detail; the problem reduces to a second-order differential equation with two irregular singular points $x = 0, \infty$ of rank 2, which is referred the double confluent Heun equation. The qualitative analysis of the equations shows that the bound states for neutron in the Coulomb field can exist only for one definite sign of the anomalous magnetic moment.

Keywords: electron, neutron, anomalous magnetic moment, Coulomb field, bound states.

Введение. Общеизвестным является использование простейших уравнений для фундаментальных частиц со спином 0, 1/2, 1. Между тем известно, что для этого могут быть также предложены уравнения, заданные в пространствах расширенных наборов неприводимых представлений собственной группы Лоренца [1–11]. Такие обобщенные (или расширенные) уравнения позволяют с самого начала ввести в теорию более сложные объекты, обладающие,

помимо спина и массы, некоторыми дополнительными физическими характеристиками, которые проявляют себя в присутствии внешних электромагнитных полей. Так, в частности, этот подход позволяет получить волновое уравнение (М. А. Петраш и др.) для частицы со спином $S = 1/2$, ненулевой массой и аномальным магнитным моментом. В настоящей работе исследуется задача о спинорной частице с аномальным магнитным моментом во внешнем кулоновском поле. Используемый формализм позволяет легко выделить представляющий специальный интерес случай незаряженной частицы с аномальным магнитным моментом (нейтрон). Установлено, что в обоих случаях возможно существование связанных состояний в системе.

1. Разделение переменных. При использовании тетрадного формализма уравнение Дирака для частицы с аномальным магнитным моментом [1] в кулоновском поле притяжения может быть представлено так [2]:

$$\left(\gamma^0 \left(i\partial_t + \frac{e^2}{r} \right) + i\gamma^3 \partial_r + \frac{1}{r} \Sigma_{\theta\phi} - M + \frac{i\Gamma}{r^2} \gamma^0 \gamma^3 \right) \psi = 0, \quad (1)$$

где использованы обозначения (связанный с аномальным моментом свободный параметр модели λ – безразмерный)

$$\frac{Mc}{\hbar} \Rightarrow M, \quad \frac{\varepsilon}{\hbar c} \Rightarrow \varepsilon, \quad 2\lambda \frac{e^2}{Mc^2} \Rightarrow \Gamma, \quad \Sigma_{\theta\phi} = \partial_\theta + \gamma^2 \frac{i\partial_\phi + i\sigma^{12}}{\sin\theta}. \quad (2)$$

Подстановка для волновой функции (используем аппарат функций Вигнера) имеет вид [2]:

$$\psi_{\varepsilon jm}(x) = e^{-i\varepsilon t} \begin{pmatrix} f_1(r)D_{-1/2} \\ f_2(r)D_{+1/2} \\ \delta f_2(r)D_{-1/2} \\ \delta f_1(r)D_{+1/2} \end{pmatrix}, \quad D_\sigma = D_{-m,\sigma}^j(\phi, \theta, 0). \quad (3)$$

Квантовые числа $\varepsilon, j, m, \delta = \pm 1$ связаны с операторами энергии, квадрата и третьей проекции полного момента, пространственной четности. Далее, учитывая явный вид матриц Дирака в спинорном представлении, находим радиальные уравнения. При этом вместо f_1 и f_2 удобно использовать их линейные комбинации: $f = (f_1 + f_2)$, $g = -i(f_1 - f_2)$. Для определенности дальше анализируем случай $\delta = +1$ (чтобы перейти к $\delta = -1$, достаточно сделать формальные замены: $M \Rightarrow -M$, $\Gamma \Rightarrow -\Gamma$):

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r} - \frac{\Gamma}{r^2} \right) f + \left(M + \varepsilon + \frac{e^2}{r} \right) g = 0, \quad \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r} + \frac{\Gamma}{r^2} \right) g + \left(M - \varepsilon - \frac{e^2}{r} \right) f = 0, \quad (4)$$

где $\nu = j + 1/2$. Из (4) получим уравнение второго порядка для функции $g(r)$:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g}{dr^2} + \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{r - e^2 / (M - \varepsilon)} \right] \frac{dg}{dr} + \\ & + \left[-M^2 + \varepsilon^2 - \frac{\Gamma^2}{r^4} + \frac{\Gamma(2\nu - 1)}{r^3} + \frac{e^6 - e^2 \nu^2 + \Gamma(M - \varepsilon)}{e^2 r^2} - \right. \\ & \left. - \frac{M - \varepsilon}{e^2} \frac{\Gamma(M - \varepsilon) / e^2 - \nu}{r - e^2 / (M - \varepsilon)} + \frac{2e^6 \varepsilon - e^2 \nu(M - \varepsilon) + \Gamma(M - \varepsilon)^2}{e^4 r} \right] g = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Уравнение для $f(r)$ будет иметь похожий вид

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 f}{dr^2} + \left[\frac{1}{r} - \frac{1}{r + e^2 / (M + \varepsilon)} \right] \frac{df}{dr} + \\ & + \left[-M^2 + \varepsilon^2 - \frac{\Gamma^2}{r^4} + \frac{\Gamma(2\nu + 1)}{r^3} + \frac{e^6 - e^2 \nu^2 + \Gamma(M + \varepsilon)}{e^2 r^2} + \right. \\ & \left. + \frac{M + \varepsilon}{e^2} \frac{\Gamma(M + \varepsilon) / e^2 + \nu}{r + e^2 / (M + \varepsilon)} + \frac{2e^6 \varepsilon - e^2 \nu(M + \varepsilon) - \Gamma(M + \varepsilon)^2}{e^4 r} \right] f = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

В уравнении (5) перейдем к новой переменной x :

$$\begin{aligned} & x = \frac{r}{e^2 / (M - \varepsilon)}, \\ & \frac{d^2 g}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x-1} \right) \frac{dg}{dx} + \left[-\frac{e^4 (M + \varepsilon)}{M - \varepsilon} + \frac{e^2 \nu - \Gamma M + \Gamma \varepsilon}{(x-1)e^2} + \frac{(2M\nu - 2\nu\varepsilon - M + \varepsilon)\Gamma}{x^3 e^2} + \right. \\ & \left. + \frac{e^6 - e^2 \nu^2 + \Gamma M - \Gamma \varepsilon}{x^2 e^2} + \frac{2e^6 \varepsilon - Me^2 \nu + e^2 \nu \varepsilon + \Gamma M^2 - 2\Gamma M \varepsilon + \Gamma \varepsilon^2}{x e^2 (M - \varepsilon)} - \frac{(M - \varepsilon)^2 \Gamma^2}{x^4 e^4} \right] g = 0. \end{aligned} \quad (7)$$

В переменной $y = 1/x$ уравнение (7) запишется так:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g}{dy^2} + \left(\frac{1}{1-y} + \frac{2}{y} \right) \frac{dg}{dy} + \left[-\frac{(M - \varepsilon)^2 \Gamma^2}{e^4} + \frac{-e^2 \nu + \Gamma M - \Gamma \varepsilon}{(-1+y)e^2} + \frac{e^4 - \nu^2 + \nu}{y^2} + \right. \\ & \left. + 2\frac{e^4 \varepsilon}{y^3 (M - \varepsilon)} - \frac{e^4 (M + \varepsilon)}{y^4 (M - \varepsilon)} + \frac{2\Gamma M \nu - 2\Gamma \nu \varepsilon + e^2 \nu - 2\Gamma M + 2\Gamma \varepsilon}{y e^2} \right] g = 0. \end{aligned}$$

Это означает, что точка $x = \infty$ является нерегулярной особенностью ранга 2. Точка $x = 0$ также является нерегулярной особой точкой ранга 2; в точке $x = 1$ имеем регулярную особенность. Введя обозначения

$$\alpha = e^2, \quad \frac{M - \varepsilon}{\alpha} = K, \quad \frac{M + \varepsilon}{\alpha} = L,$$

уравнение (6) можно представить так:

$$\begin{aligned} & \frac{d^2 g}{dx^2} + \left(\frac{1}{x} - \frac{1}{x-1} \right) \frac{dg}{dx} + \left[-\alpha^2 \frac{L}{K} + \frac{\nu - \Gamma K}{x-1} + \right. \\ & \left. + \frac{1}{x} \left(\frac{2\alpha \varepsilon}{K} - \nu + \Gamma K \right) + \frac{\alpha^2 - \nu^2 + \Gamma K}{x^2} + \frac{\Gamma K (2\nu - 1)}{x^3} - \frac{K^2 \Gamma^2}{x^4} \right] g = 0; \end{aligned} \quad (8a)$$

сопутствующая функция f может быть вычислена на основании уравнения

$$\left(\frac{d}{dx} - \frac{\nu}{x} + \frac{\Gamma K}{x^2} \right) g + \alpha \frac{x-1}{x} f = 0. \quad (8b)$$

В соответствии с характером сингулярных точек будем строить локальные решения для $g(x)$ около точки $x = 0$ в виде

$$g(x) = x^\alpha e^{\beta x^{-1}} G(x).$$

Для функции $G(x)$ получаем уравнение

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + \left(\frac{1+2a}{x} - \frac{2b}{x^2} - \frac{1}{x-1} \right) \frac{dG}{dx} + \left(A + \frac{A_1 + a - b}{x} + \frac{A_2 + a^2 - b}{x^2} + \frac{A_3 - 2ab + b}{x^3} + \frac{A_4 + b^2}{x^4} + \frac{B - a + b}{x-1} \right) G = 0.$$

Пусть

$$A_3 - 2ab + b = 0, \quad A_4 + b^2 = 0.$$

Эти соотношения имеют два решения (отмечаем, что $A_4 = -K^2 \Gamma^2 < 0$):

$$1) \quad b_1 = \sqrt{-A_4}, \quad a_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{A_3}{b} + 1 \right) = \frac{1}{2} \left(\frac{A_3}{\sqrt{-A_4}} + 1 \right), \quad (9a)$$

$$2) \quad b_2 = -\sqrt{-A_4}, \quad a_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{A_3}{b} + 1 \right) = \frac{1}{2} \left(-\frac{A_3}{\sqrt{-A_4}} + 1 \right). \quad (9б)$$

Уравнение для G упрощается (следим сразу за двумя вариантами):

$$\frac{d^2 G}{dx^2} + \left(\frac{1+2a}{x} - \frac{2b}{x^2} - \frac{1}{x-1} \right) \frac{dG}{dx} + \left(A + \frac{A_1 + a - b}{x} + \frac{A_2 + a^2 - b}{x^2} + \frac{B - a + b}{x-1} \right) G = 0. \quad (10)$$

Решения для функций $G(x)$ могут быть построены в виде степенных рядов. Исследован характер 5-членных рекуррентных соотношений для коэффициентов ряда – на деталях останавливаться не будем. Из этих соотношений, следуя методу Пуанкаре – Перрона, можно показать, что радиус сходимости построенных степенных рядов равен либо единице, либо бесконечности.

2. Случай частицы с нулевым электрическим зарядом. Можно предельным переходом получить описание ситуации с нулевым электрическим зарядом и ненулевым магнитным моментом:

$$e^2 \rightarrow 0, \quad \lambda \rightarrow \infty, \quad e^2 \lambda \rightarrow \lambda = \text{const}. \quad (11)$$

Рассмотрим этот случай детально (он относится, например, к нейтрону):

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\nu}{r} - \frac{\Gamma}{r^2} \right) f + (\varepsilon + M) g = 0, \quad \left(\frac{d}{dr} - \frac{\nu}{r} + \frac{\Gamma}{r^2} \right) g - (\varepsilon - M) f = 0. \quad (12)$$

Имеем два уравнения второго порядка:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu+1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu+1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4} \right) f = 0, \quad (13)$$

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu-1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu-1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4} \right) g = 0; \quad (14)$$

они связаны симметрией $\nu \Rightarrow -\nu$, $\Gamma \Rightarrow -\Gamma$.

Приведем уравнения к нормальной форме дважды конфлюэнтного уравнения Гойна [3]. Для этого сделаем линейную замену переменной: $z = kr$, $k = \pm 2\sqrt{M^2 - \varepsilon^2}$, тогда имеем

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{4} - \frac{\nu(\nu+1)}{z^2} + \frac{2\Gamma k(\nu+1)}{z^3} - \frac{\Gamma^2 k^2}{z^4} \right) f = 0, \quad (15a)$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - \frac{1}{4} - \frac{\nu(\nu-1)}{z^2} + \frac{2\Gamma k(\nu-1)}{z^3} - \frac{\Gamma^2 k^2}{z^4} \right) g = 0. \quad (15b)$$

Нас интересуют решения, отвечающие связанным состояниям; при этом должно выполняться неравенство $M^2 - \varepsilon^2 > 0$. Для определенности используем вариант

$$k = +2\sqrt{M^2 - \varepsilon^2} > 0, \quad z = +2\sqrt{M^2 - \varepsilon^2} r, \quad z \in [0, +\infty).$$

Будем следить за функцией $f(z)$; чтобы перейти к аналогичным результатам для $g(z)$, достаточно сделать формальные замены $\nu \Rightarrow -\nu$, $\Gamma \Rightarrow -\Gamma$. В уравнении для f делаем подстановку $f(z) = z^A e^{Bz} e^{C/z} F(z)$. Уравнение для $F(z)$ запишется так:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 F}{dz^2} + \left(2B + \frac{2A}{z} - \frac{2C}{z^2} \right) \frac{dF}{dz} + \left[\left(-\frac{1}{4} + B^2 \right) + \frac{2AB}{z} + \frac{A^2 - A - 2BC - \nu(\nu+1)}{z^2} + \right. \\ \left. + \frac{2\Gamma k(\nu+1) - 2AC + 2C}{z^3} + \frac{C^2 - \Gamma^2 k^2}{z^4} \right] F = 0. \end{aligned} \quad (16)$$

Пусть $B = -1/2$; из обращения в нуль коэффициента при z^{-4} получим $C = \pm \Gamma k$. Из обращения в нуль коэффициента при z^{-3} находим $A = \nu + 2$, $-\nu$. В результате для функции $F(z)$ находим более простое уравнение

$$\frac{d^2 F}{dz^2} + \left(-1 + \frac{2A}{z} - \frac{2C}{z^2} \right) \frac{dF}{dz} + \left(-\frac{A}{z} + \frac{A^2 - A + C - \nu(\nu+1)}{z^2} \right) F = 0. \quad (17)$$

Оно имеет структуру канонической формы дважды вырожденного уравнения Гойна (придерживаемся обозначений из [13]):

$$\frac{d^2 F}{dz^2} + \left(-1 + \frac{c}{z} + \frac{t}{z^2} \right) \frac{dF}{dz} + \frac{-az + \lambda}{z^2} F = 0, \quad (18)$$

где параметры $\{c, t, a, \lambda\}$ задаются равенствами

$$c = 2A, \quad t = -2C, \quad a = A, \quad \lambda = A^2 - A + C - \nu(\nu+1).$$

Возникают две возможности в зависимости от выбора C :

$$\begin{aligned} \text{I) } C = +\Gamma k, \quad A = \nu + 2, \quad f(z) = z^{2+\nu} e^{-z/2} e^{+\Gamma k/z} F(z), \\ c = 4 + 2\nu, \quad t = -2\Gamma k, \quad a = 2 + \nu, \quad \lambda = +\Gamma k + 2\nu + 2; \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \text{II) } C = -\Gamma k, \quad A = -\nu, \quad f(z) = z^{-\nu} e^{-z/2} e^{-\Gamma k/z} F(z), \\ c = -2\nu, \quad t = +2\Gamma k, \quad a = -\nu, \quad \lambda = -\Gamma k. \end{aligned} \quad (20)$$

В случае функции $g(z)$ будем иметь соотношения:

$$\begin{aligned} \text{I) } C = -\Gamma k, \quad A = 2 - \nu, \quad g(z) = z^{2-\nu} e^{-z/2} e^{-\Gamma k/z} G(z), \\ c = 4 - 2\nu, \quad t = +2\Gamma k, \quad a = 2 - \nu, \quad \lambda = -\Gamma k - 2\nu + 2; \end{aligned} \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \text{II) } C = +\Gamma k, \quad A = \nu, \quad f(z) = z^{+\nu} e^{-z/2} e^{+\Gamma k/z} G(z), \\ c = +2\nu, \quad t = -2\Gamma k, \quad a = +\nu, \quad \lambda = +\Gamma k. \end{aligned} \quad (22)$$

Строим локальные решения дважды вырожденного уравнения Гойна (18) с помощью подстановки $H(z) = z^M e^{N/z} h(z)$; для функции $h(z)$ получим уравнение

$$\begin{aligned} z^2 \frac{d^2 h}{dz^2} + [-z^2 + (2M + c)z - 2N + t] \frac{dh}{dz} + \\ + \left[(-M - a)z + (M^2 + Mc - M + N + \lambda) + \frac{-2MN + tM - Nc + 2N}{z} + \frac{N(N - t)}{z^2} \right] h = 0. \end{aligned}$$

Обратим в нуль коэффициенты при степенях z^{-1}, z^{-2} , полученные при этом соотношения имеют два решения:

$$\begin{aligned} 1) \quad M_1 = 0, \quad N_1 = 0, \quad H_1(z) = h_1(z); \\ 2) \quad M_2 = 2 - c, \quad N_2 = t, \quad H_2(z) = z^{2-c} e^{t/z} h_2(z). \end{aligned} \quad (23)$$

При этом уравнение для функции $h(z)$ упрощается. В случаях 1) и 2) оно принимает соответственно вид:

$$1) \quad \left(z^2 \frac{d^2}{dz^2} + (-z^2 + cz + t) \frac{d}{dz} + (-az + \lambda) \right) h_1 = 0; \quad (24)$$

$$2) \quad \left(z^2 \frac{d^2}{dz^2} + [-z^2 + (4 - c)z - t] \frac{d}{dz} + [-(a - c + 2)z + (\lambda + 2 - c + t)] \right) h_2 = 0. \quad (25)$$

Уравнение (25) для $h_2(z)$ можно также рассматривать как дважды вырожденное уравнение Гойна вида (24), но с другими (штрихованными) параметрами:

$$c' = 4 - c, \quad t' = -t, \quad a' = a - c + 2, \quad \lambda' = \lambda + 2 - c + t.$$

Решения для функций $h(x)$ могут быть построены в виде степенных рядов. Описан известный характер 3-членного зацепления коэффициентов в соответствующих степенных рядах – на деталях останавливаться не будем.

3. Качественный анализ дифференциальных уравнений. Возвратимся к уравнениям второго порядка (13), (14):

$$\begin{aligned} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu+1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu+1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4} \right) f = 0, \\ \left(\frac{d^2}{dr^2} + \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu-1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu-1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4} \right) g = 0; \end{aligned}$$

напоминаем, что уравнения связаны симметрией $\nu \Rightarrow -\nu, \Gamma \Rightarrow -\Gamma$.

Каждое из этих уравнений при фиксированных ν, Γ описывает по две разные ситуации:

$$\begin{aligned} \nu(\nu+1) = x(x+1) &\Rightarrow x' = \nu, \quad \Gamma' = +\Gamma; \quad x'' = -\nu-1, \quad \Gamma'' = -\Gamma; \\ \nu(\nu-1) = y(y-1) &\Rightarrow y'' = \nu, \quad \Gamma'' = +\Gamma; \quad y' = -\nu+1, \quad \Gamma' = -\Gamma. \end{aligned}$$

Это соответствует тому, что у каждого уравнения второго порядка есть два линейно независимых решения; без специального анализа наперед нельзя указывать пары решений, связываемых дифференциальными операторами первого порядка (но именно такие пары являются решениями исходной задачи).

Эти уравнения можно исследовать качественно, анализируя функции $P^2(z), Q^2(z)$:

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + P^2(r) \right) f(r) = 0, \quad \left(\frac{d^2}{dr^2} + Q^2(r) \right) g(r) = 0.$$

Установим поведение этих функций

$$\begin{aligned} P^2(r) &= \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu+1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu+1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4}, \\ Q^2(r) &= \varepsilon^2 - M^2 - \frac{\nu(\nu-1)}{r^2} + 2\Gamma \frac{\nu-1}{r^3} - \frac{\Gamma^2}{r^4} \end{aligned} \quad (26)$$

около особых точек $r = 0, r = +\infty$:

$$\begin{aligned} r \rightarrow 0, \quad P^2(r) &= -\frac{\Gamma^2}{r^4} < 0, \quad Q^2(r) = -\frac{\Gamma^2}{r^4} < 0, \\ r \rightarrow +\infty, \quad P^2 &= \varepsilon^2 - M^2 < 0, \quad Q^2(r) = \varepsilon^2 - M^2 < 0. \end{aligned} \quad (27)$$

Области, где квадрат эффективного импульса отрицательный, запрещены для классического движения частицы; предполагаем описание связанных состояний в системе, в соответствии с чем должна существовать область финитного движения частицы. Исследуем точки поворота – решения уравнений $P^2(r) = 0$ и $Q^2(r) = 0$:

$$\begin{aligned} P^2(r) = 0, \quad (\varepsilon^2 - M^2)r^4 - \nu(\nu+1)r^2 + 2\Gamma(\nu+1)r - \Gamma^2 &= 0; \\ Q^2(r) = 0, \quad (\varepsilon^2 - M^2)r^4 - \nu(\nu-1)r^2 + 2\Gamma(\nu-1)r - \Gamma^2 &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Для корней этих полиномов имеем тождества:

$$\begin{aligned} P^2, \quad (\varepsilon^2 - M^2)r^4 - \nu(\nu+1)r^2 + 2\Gamma(\nu+1)r - \Gamma^2 &= (\varepsilon^2 - M^2)(r-r_1)(r-r_2)(r-r_3)(r-r_4), \\ Q^2, \quad (\varepsilon^2 - M^2)r^4 - \nu(\nu-1)r^2 + 2\Gamma(\nu-1)r - \Gamma^2 &= (\varepsilon^2 - M^2)(r-R_1)(r-R_2)(r-R_3)(r-R_4); \end{aligned}$$

откуда находим ограничения для корней:

$$\begin{aligned} \underline{P^2}, \quad r_1 + r_2 + r_3 + r_4 &= 0, \\ (r_1r_2 + r_1r_3 + r_1r_4 + r_2r_3 + r_2r_4 + r_3r_4) &= -\frac{\nu(\nu+1)}{\varepsilon^2 - M^2}, \\ (-r_2r_3r_4 - r_1r_3r_4 - r_1r_2r_4 - r_1r_2r_3) &= \frac{2\Gamma(\nu+1)}{\varepsilon^2 - M^2}, \\ r_1r_2r_3r_4 &= \frac{\Gamma^2}{M^2 - \varepsilon^2} > 0; \end{aligned} \quad (29)$$

$$\begin{aligned}
& \underline{Q}^2, \quad R_1 + R_2 + R_3 + R_4 = 0, \\
& (R_1R_2 + R_1R_3 + R_1R_4 + R_2R_3 + R_2R_4 + R_3R_4) = -\frac{v(v-1)}{\varepsilon^2 - M^2}, \\
& (-R_2R_3R_4 - R_1R_3R_4 - R_1R_2R_4 - R_1R_2R_3) = \frac{2\Gamma(v-1)}{\varepsilon^2 - M^2}, \\
& R_1R_2R_3R_4 = \frac{\Gamma^2}{M^2 - \varepsilon^2} > 0.
\end{aligned} \tag{30}$$

Учитывая для каждого случая первое и четвертое уравнения, заключаем, что невозможно иметь четыре положительных или четыре отрицательных корня, но, например, возможно иметь два положительных корня и два отрицательных, или два положительных и два комплексно сопряженных:

$$\begin{aligned}
(r_1, r_2, r_3, r_4) & \longrightarrow (-, -, +, +), (z, z^*, +, +); \\
(R_1, R_2, R_3, R_4) & \longrightarrow (-, -, +, +), (Z, Z^*, +, +).
\end{aligned} \tag{31}$$

Это означает, что существует область значений параметров, для которой реализуется ситуация с финитным движением между двумя положительными точками поворота. Можно ожидать существования связанных состояний в системе незаряженная частица со спином $1/2$ и аномальным магнитным моментом в кулоновском поле.

Таким образом, качественный анализ указывает на то, что для частицы с нулевым электрическим зарядом и ненулевым аномальным магнитным моментом связанные состояния во внешнем кулоновском поле (притяжения) могут возникать только при положительном параметре Γ .

Авторы выражают благодарность В. В. Киселю и В. М. Редькову за полезные советы и помощь в работе.

Список использованной литературы

1. Фрадкин, Е. С. К теории частиц с высшими спинами / Е. С. Фрадкин // ЖЭТФ. – 1950. – Т. 20. – С. 27–38.
2. Файнберг, В. Я. К теории взаимодействия частиц с высшими спинами с электромагнитным и мезонным полями / В. Я. Файнберг // Тр. ФИАН СССР. – 1955. – Т. 6. – С. 269–332.
3. Petras, M. A note to Bhabha's equation for a particle with maximum spin $3/2$ / M. Petras // Czech. J. Phys. – 1955. – Vol. 5, N. 3. – P. 418–419.
4. Улегла, И. Аномальные уравнения для частиц со спином $1/2$ / И. Улегла // ЖЭТФ. – 1957. – Т. 33. – С. 473–477.
5. Федоров, Ф. И. Волновые уравнения с кратными представлениями группы Лоренца. Целый спин / Ф. И. Федоров, В. А. Плетюхов // Вес. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1969. – № 6. – С. 81–88; *Они же*. Волновые уравнения с кратными представлениями группы Лоренца. Полуцелый спин // Вес. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1970. – № 3. – С. 78–83; *Они же*. Волновые уравнения с кратными представлениями для частицы со спином 0 // Вес. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1970. – № 2. – С. 79–85; *Они же*. Волновые уравнения с кратными представлениями для частицы со спином 1 // Вес. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1970. – № 3. – С. 84–92.
6. Capri, A. Z. Nonuniqueness of the spin $1/2$ equation / A. Z. Capri // Phys. Rev. – 1969. – Vol. 178, N 5. – P. 1811–1815; *Idem*. First-order wave equations for half-odd-integral spin // Phys. Rev. – 1969. – Vol. 178. – P. 2427–2433; *Idem*. Electromagnetic properties of a new spin- $1/2$ field // Progr. Theor. Phys. – 1972. – Vol. 48. – P. 1364–1374.
7. Богуш, А. А. Уравнения с кратными представлениями группы Лоренца и взаимодействие типа Паули / А. А. Богуш, В. В. Кисель // Вес. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. – 1979. – № 3. – С. 61–65; *Они же*. Описание свободной частицы различными волновыми уравнениями // Докл. АН БССР. – 1984. – Т. 28. – № 8. – С. 702–705; *Они же*. Уравнение для частицы со спином $1/2$, обладающей аномальным магнитным моментом // Изв. вузов. Физика. – 1984. – № 1. – С. 23–27.

8. Об описании поляризуемости скалярных частиц в теории релятивистских волновых уравнений / А. А. Богуш [и др.] // Ковариантные методы в теоретической физике. Физика элементарных частиц и теория относительности / ИФ АН БССР. – Минск, 1981. – С. 81–90.
9. Богуш, А. А. Об интерпретации дополнительных компонент волновых функций при электромагнитном взаимодействии / А. А. Богуш, В. В. Кисель, Ф. И. Федоров // Докл. АН СССР. – 1984. – Т. 277, № 2. – С. 343–346.
10. Теория Петраша для частицы со спином $1/2$ в искривленном пространстве-времени / А. А. Богуш [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2002. – № 1. – С. 63–68.
11. Плетюхов, В. А. Релятивистские волновые уравнения и внутренние степени свободы / В. А. Плетюхов, В. М. Редьков, В. И. Стражев. – Минск: Беларус. навука, 2015.
12. Редьков, В. М. Тетрадный формализм, сферическая симметрия и базис Шредингера / В. М. Редьков. – Минск: Беларус. наука, 2011.
13. Slavyanov, S. Yu. Special functions. A unified theory based on singularities / S. Yu. Slavyanov, W. Lay. – New York: Oxford University Press, 2000.

Поступила в редакцию 22.04.2016

УДК 533.9;537.525.99;544.478.1

*Н. А. САВАСТЕНКО¹, И. И. ФИЛАТОВА², В. А. ЛЮШКЕВИЧ², Н. И. ЧУБРИК²,
М. Т. ГАБДУЛЛИН³, Т. С. РАМАЗАНОВ³, Х. А. АБДУЛЛИН³, Ж. К. КАЛКОЗОВА³*

ОПТИЧЕСКИЕ И СТРУКТУРНЫЕ СВОЙСТВА ФОТОКАТАЛИЗАТОРОВ НА ОСНОВЕ ZnO

¹*МГЭИ им. А. Д. Сахарова БГУ, Минск, Беларусь, e-mail: nataliesavastenko@iseu.by*

²*Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: i.filatova@dragon.bas-net.by*

³*Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа,
Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, Алматы, Казахстан, e-mail:*

Исследованы оптические, структурные и каталитические свойства допированных атомами алюминия (Al) фотокатализаторов на основе оксида цинка (ZnO), которые получены методом гидротермального синтеза. Проведено сравнение каталитической активности синтезированных фотокатализаторов до и после обработки в плазме диэлектрического барьерного разряда с активностью промышленно полученного порошка ZnO. Показано, что эффективность реакции фотодegradации метилового оранжевого (МО), выраженная в терминах константы реакции МО, для синтезированных фотокатализаторов выше в 3,6 раза, чем для промышленного образца, и увеличивается приблизительно на 60 % после обработки фотокатализаторов в плазме.

Ключевые слова: плазменная обработка, ZnO, фотокатализ, фотометрия, гидротермальный синтез, сканирующая электронная микроскопия (СЭМ), фотолюминесценция.

*N. A. SAVASTENKO¹, I. I. FILATOVA², V. A. LYUSHKEVICH², N. I. CHUBRIK², M. T. GABDULLIN³,
T. S. RAMASANOV³, Kh. A. ABDULLIN³, Zh. K. KALKOSOVA³*

OPTICAL AND STRUCTURAL PROPERTIES OF ZnO-BASED PHOTOCATALYSTS

¹*ISEU BSU, Minsk, Belarus, e-mail: nataliesavastenko@iseu.by*

²*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: i.filatova@dragon.bas-net.by*

³*National Nanotechnology Laboratory of Open Type, Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, Kazakhstan*

Optical, structural and catalytic properties of Al-doped ZnO-based photocatalysts were investigated. The hydrothermal synthesis was used to synthesize the catalysts. Dielectric barrier discharge plasma was applied to treat the synthesized samples. The performance of plasma-treated and untreated catalysts was compared with that of commercially available catalysts. The photocatalytic activity, expressed in terms of the rate of photodegradation of methyl orange, was 3.6 times higher for synthesized samples than that for commercial catalyst. The photocatalytic activity was up to 60 % higher for the plasma-treated samples than for the untreated ones.

Keywords: plasma treatment, ZnO, photocatalysis, UV-visible spectrophotometry, hydrothermal synthesis, scanning electron microscopy (SEM), photoluminescence (PL).

Введение. Использование полупроводниковых материалов на основе оксида цинка (ZnO) для фотокаталитической деструкции (фотодegradации) органических соединений в водной среде рассматривается как один из наиболее перспективных технологических подходов к решению проблемы очистки сточных вод [1–5]. Привлекательность фотокатализа как метода очистки обусловлена возможностью разложения вредных органических примесей до элементарных неорганических элементов. В связи с тем, что эффективность существующих катализаторов недостаточно высока для широкого применения фотокаталитических технологий в промышленных масштабах, создание новых фотокаталитических систем и модификация уже существующих катализаторов является актуальной задачей.

Процесс фотокаталитического разложения органических примесей в водных растворах на поверхности катализатора происходит под действием поглощенного излучения в видимой и ультрафиолетовой областях, энергия которого выше ширины запрещенной зоны полупроводникового катализатора. Под воздействием поглощенных фотонов в зоне проводимости образуется электрон, оставляющий в валентной зоне дырку. Фотоиндуцированная пара электрон-дырка участвует в ряде окислительно-восстановительных реакций на поверхности катализатора, сопровождающихся появлением высокоактивных гидроксильных и других радикалов, которые, в свою очередь, приводят к окислительной деградации органических веществ [6].

Очевидно, что для повышения эффективности фотокатализатора необходимо увеличить время жизни фотоиндуцированной пары электрон-дырка, в частности, за счет появления рекомбинационных ловушек, в качестве которых могут выступать различные примеси или дефекты кристаллической структуры, создающие в запрещенной зоне энергетические уровни [1], рекомбинация через которые оказывается более вероятной, чем межзонная рекомбинация. Кроме того, за счет выбора примесных атомов можно управлять временем жизни носителей заряда.

Таким образом, исследования, направленные на повышение активности катализаторов, проводятся в двух направлениях: разработка новых эффективных и дешевых методов синтеза фотоактивных материалов (в том числе допированных различными примесями) и модификация поверхности синтезированных катализаторов.

В настоящее время интенсивно развивается гидротермальный метод синтеза, позволяющий при варьировании температуры технологического процесса и состава исходных растворов целенаправленно изменять свойства и морфологию получаемого материала [7]. В предыдущей работе авторов настоящей статьи [8] фотокаталитическая активность коммерчески доступного порошка ZnO («ЭКОС-1», Россия) была повышена путем его обработки в плазме высокочастотного разряда пониженного давления и диэлектрического барьерного разряда атмосферного давления, причем эффективность обработки с использованием последнего была выше. В данной работе исследованы оптические, структурные и каталитические свойства допированных атомами Al фотокатализаторов на основе ZnO, синтезированных гидротермальным методом (далее – ZnO_{гидр}). Для повышения активности синтезированных материалов осуществляли их обработку в плазме диэлектрического барьерного разряда. Проведено сравнение активности фотокатализаторов ZnO_{гидр} и промышленно полученного порошка ZnO.

Экспериментальная установка, материалы и методы исследований. Для синтеза фотокатализаторов использовали исходные компоненты квалификации ЧДА: нитрат цинка (Zn(NO₃)₂), уротропин (C₆H₁₂N₄) и хлорид алюминия (AlCl₃). Гидротермальный синтез образцов проводился при температуре 90 °С с использованием смеси растворов уротропина и нитрата цинка при равных концентрациях реагентов (0,3 М), а также хлорида алюминия при концентрации 2 ат.% (образец ZnO_{гидр}-1) и 4 ат.% (образец ZnO_{гидр}-2). Длительность синтеза составляла 2 ч.

Обработку синтезированных образцов проводили в плазме диэлектрического барьерного разряда. Обобщенная схема установки представлена на рис. 1, а. Разряд возбуждался между изолированным электродом и заземленной металлической поверхностью. Питающее напряжение от импульсного генератора подавалось на внутренний металлический сердечник изолированного цилиндрического электрода. Задающий генератор источника питания барьерного разряда работал на частоте 1 кГц. Сформированные высоковольтные импульсы имели следующую внутреннюю структуру: высокочастотное заполнение в виде затухающих колебаний с частотой 24 кГц, обусловленных резонансными свойствами выходного высоковольтного трансформатора. Осциллограмма временной структуры электрического поля единичного импульса в разрядном промежутке представлена на рис. 1, б. Обрабатываемые образцы размещались на заземленном электроде. Рабочие режимы (амплитуда напряжения – 30 кВ, выходная мощность – 45 Вт, длительность обработки – 25 мин) соответствовали условиям обработки коммерческих катализаторов ZnO [8]. Исследование микроструктуры синтезированных образцов осуществляли методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на растровом электронном микроскопе SUPRA-55WDS («Carl Zeiss AG», Германия) при ускоряющем напряжении 15 кВ.

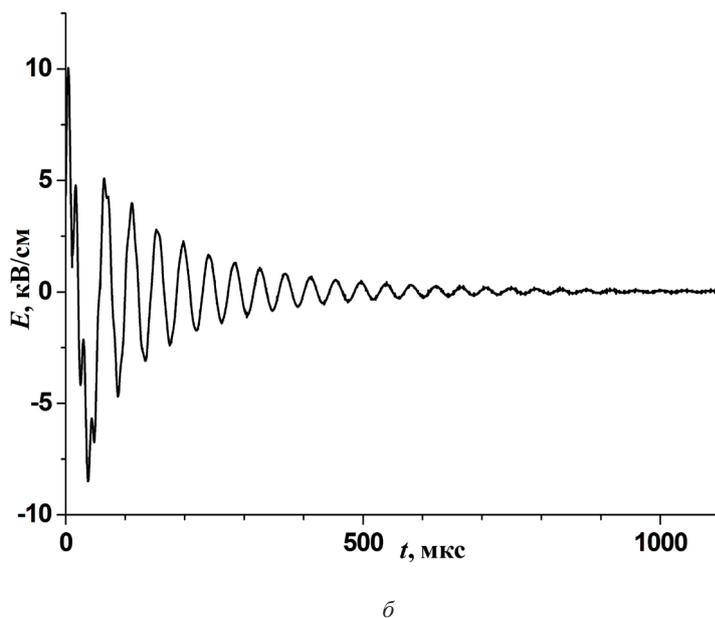
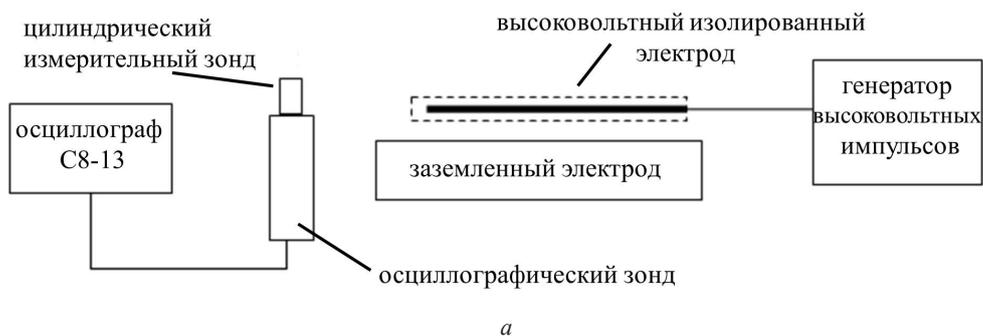


Рис. 1. Схема экспериментальной установки на основе барьерного разряда (а) и временная структура электрического поля в межэлектродном промежутке разряда (б)

Фотокаталитическую активность исследовали в модельной реакции разложения красителя метилового оранжевого ($C_{14}H_{14}N_3NaO_3S$) (МО) под действием ультрафиолетового излучения в водных суспензиях синтезированных образцов. Для приготовления суспензии навеску катализатора массой 0,1 г смешивали с 50 мл водного раствора метилового оранжевого концентрацией 50 мг/л, приготовленного на основе дистиллированной воды. Выбранная концентрация красителя для модельной реакции находится в диапазоне концентраций красителей, содержащихся в сточных водах текстильной промышленности [1–3]. Установлено также, что значение концентрации МО попадает в линейный диапазон калибровочного графика зависимости оптической плотности от концентрации красителя. Суспензии катализаторов в водных растворах красителей подвергали воздействию УФ-излучения, в качестве источника которого использовали ртутно-кварцевую лампу ДРТ-240 (мощность 240 Вт). Исследуемые образцы помещали в чашки Петри на расстоянии 10 см от источника облучения. Уровень освещенности в зоне воздействия, оцененный с помощью люксметра ТКА-ЛЮКС, в видимой области и ближнем УФ-диапазоне составлял 150 клк. Облучение образцов проводили в течение 2 ч до полного их обесцвечивания. В процессе облучения контролировали изменение концентрации МО в растворе с помощью спектрофотометра SOLAR PB 2201 («SOLAR», Беларусь). Отбор контрольных проб объемом 1 мл осуществляли перед облучением, спустя 10 мин после его начала и затем каждые 20 мин вплоть до полного обесцвечивания раствора. Перед каждым отбором проб раствор перемешивали.

Относительную концентрацию красителя C_r определяли по данным измерений оптической плотности в максимуме поглощения красителя на длине волны 465 нм:

$$C_r = \frac{C(t)}{C_0} \cdot 100 \% = \frac{A_t^{465}}{A_0^{465}} \cdot 100 \%, \quad (1)$$

где C_0 – начальная концентрация красителя, $C(t)$ – концентрация красителя после облучения его УФ-излучением в момент времени t , A_0^{465} и A_t^{465} – оптическая плотность раствора красителя на длине волны 465 нм до начала облучения и в момент времени t после начала облучения образца соответственно.

Константы скоростей реакции фотодеградации (половинного и первого порядка), используемые в качестве количественной характеристики фотокаталитической активности образцов, рассчитывали из анализа зависимостей концентрации красителя от времени облучения суспензии УФ-излучением.

Дополнительно контролировали изменение оптической плотности красителя $\eta(t)$ на длине волны 192 нм:

$$\eta = \frac{A_t^{192}}{A_0^{192}} \cdot 100 \%, \quad (2)$$

где A_0^{192} и A_t^{192} – величины оптической плотности раствора красителя на длине волны 192 нм до начала облучения и спустя время t после начала облучения красителя.

Измерения фотolumинесцентных (ФЛ) свойств синтезированных образцов до и после обработки в плазме выполняли с помощью модернизированного измерительного комплекса СДЛ-2 («ЛЮМО», СССР), состоящего из светосильного монохроматора возбуждения МДР-12 и монохроматора регистрации МДР-23. В качестве источника возбуждения использовали ксеноновую лампу ДКсШ-120. Измерения проводили при комнатной температуре. Осуществляли сканирование по спектру испускания (при фиксированной длине волны возбуждения) и по спектру возбуждения (варьировали длину волны возбуждения и регистрировали изменение интенсивности испускания света на фиксированной длине волны). Длина волны возбуждающего излучения составляла 330 нм, излучение испускания регистрировали в диапазоне 350–750 нм.

Таким образом, был выполнен сравнительный анализ каталитической активности синтезированных образцов ($ZnO_{\text{гидр}}-1$, $ZnO_{\text{гидр}}-2$ – до обработки и $ZnO_{\text{гидр}}-1pl$ и $ZnO_{\text{гидр}}-2pl$ – после воздействия плазмы) и полученных промышленным способом катализаторов ZnO квалификации Ч («ЭКОС-1», Россия).

Результаты и их обсуждение. Одним из факторов, определяющих активность гетерогенных катализаторов, является состояние их поверхности. На рис. 2 приведены типичные СЭМ-изображения поверхности синтезированных образцов $ZnO_{\text{гидр}}-1$ и $ZnO_{\text{гидр}}-2$, а также образца сравнения ZnO . Образец $ZnO_{\text{гидр}}-1$ содержал частицы неправильной геометрической формы с линейными размерами, изменяющимися в диапазоне от 30 нм до 4,5 мкм (рис. 2, а). Частицы в образце $ZnO_{\text{гидр}}-2$ имели форму гексагональных стержней, растущих из одного центра. Наблюдались также отдельные удлиненные кристаллы с гексагональным сечением, длина которых варьировалась в диапазоне от 2,5 до 5,5 мкм, характерный диаметр составлял 1–2,5 мкм (рис. 2, б). Линейные размеры массивов изменялись от 2 до 8 мкм. Микроструктура образца сравнения ZnO близка к микроструктуре $ZnO_{\text{гидр}}-1$ (рис. 2, в), однако характерные размеры частиц образца ZnO (100 нм – 1 мкм) были меньше размеров частиц, встречающихся в образце $ZnO_{\text{гидр}}-1$.

В результате предварительных экспериментов, позволяющих выявить возможность разложения красителя в растворе при УФ-облучении в отсутствие катализатора (фотолиз), было показано, что метиловый оранжевый в отсутствие катализатора в растворе не разлагается. Также не было обнаружено значимого изменения концентрации красителя в результате его адсорбции на поверхности образцов. В обоих случаях изменение концентрации красителя не превышало 2,5 %.

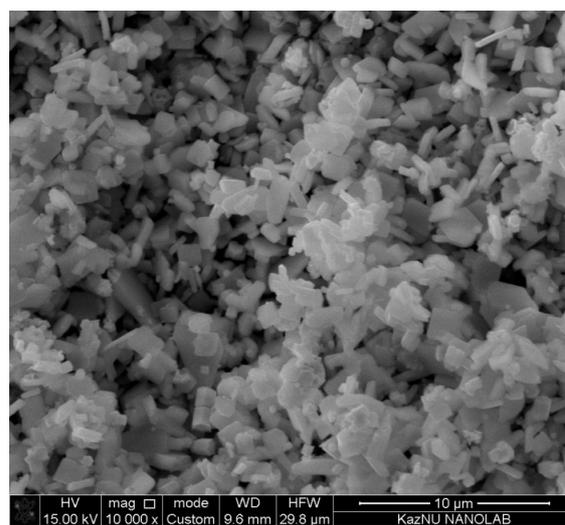
Контроль изменений концентрации красителя осуществлялся в максимуме полосы поглощения красителя (465 нм).

При воздействии излучения в УФ-диапазоне на водные растворы МО в присутствии исследуемых фотокатализаторов наблюдалось обесцвечивание раствора (деколорация) вследствие деструкции красителя. В спектре исходного раствора метилового оранжевого регистрировали 3 полосы поглощения с максимумами на длинах волн 192, 270 и 465 нм. Полоса поглощения на длине волны 192 нм является характерной для бензильных групп [9]. Слабоинтенсивная полоса вблизи 270 нм имеет асимметричную форму, обусловленную наложением двух переходов ${}^1B_u \leftarrow {}^1G_g$ ($\pi^* \leftarrow n$) [10]. Поглощение на длине волны 465 нм соответствует переходу ${}^1W \leftarrow {}^1A_g$ ($\pi^* \leftarrow n$) [10]. Изменение поглощения красителя в этом диапазоне отражает динамику его фотодegradации. В процессе фотодegradации новые полосы поглощения в спектре метилового оранжевого не появлялись.

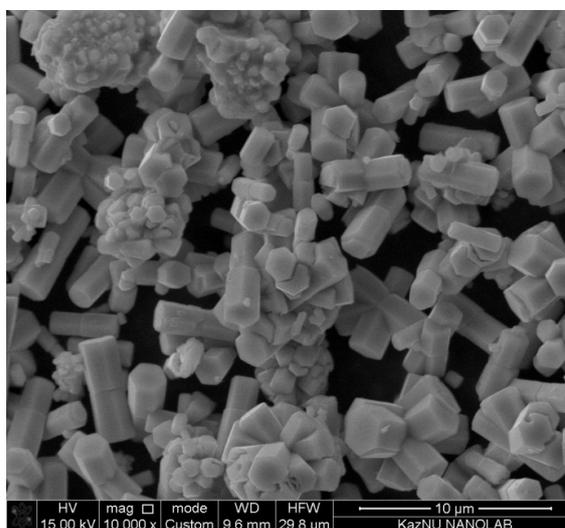
На рис. 3, а представлено изменение относительной концентрации метилового оранжевого (C_r), определенной по оптической плотности в максимуме поглощения красителя на длине волны 465 нм. Установлено, что в течение первых 10 мин облучения концентрация красителя в присутствии синтезированных образцов $ZnO_{гидр-1}$ и $ZnO_{гидр-2}$ значительно снижается (приблизительно на 40 %), в то время как на образце сравнения (ZnO) фотодegradация красителя не наблюдается (концентрация МО изменяется в пределах 3 %).

Установлено, что обработка фотокатализаторов в плазме поверхностного барьерного разряда приводит к повышению их активности. В течение первых 10 мин облучения суспензий обработанных в плазме катализаторов ($ZnO_{гидр-1pl}$ и $ZnO_{гидр-2pl}$) разлагалось более 70 % красителя, содержащегося в исходном растворе. Практически полное разложение метилового оранжевого (95 % и более) наблюдалось через 60 мин в присутствии обработанных в плазме катализаторов и через 90 мин при использовании необработанных образцов. Облучение раствора МО в присутствии катализатора сравнения ZnO в течение 120 минут приводило к деструкции 80 % содержащегося в растворе красителя.

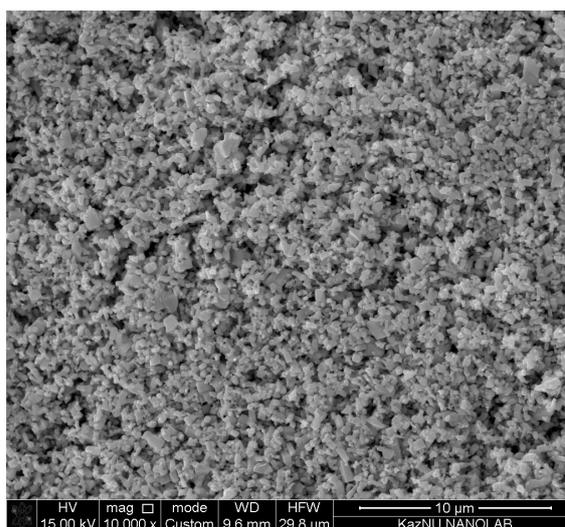
В ряду исследуемых фотокатализаторов активность убывала в следующей последовательности: $ZnO_{гидр-1pl} > ZnO_{гидр-2pl} > ZnO_{гидр-1} > ZnO_{гидр-2} > ZnO$.



а



б



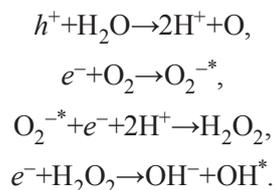
в

Рис. 2. Микрофотографии СЭМ поверхности образцов $ZnO_{гидр-1}$ (а), $ZnO_{гидр-2}$ (б) и ZnO (в)

Таким образом, различие условий гидротермального синтеза катализаторов, приводящее к существенному изменению их морфологии, слабо влияло на фотокаталитические свойства образцов. При этом все синтезированные порошки $ZnO_{\text{гидр}}$ превосходили по каталитическим свойствам коммерческие образцы ZnO .

Временная зависимость изменения относительной оптической плотности красителя $\eta(t)$ на длине волны 192 нм в ходе реакции фотодегradации представлена на рис. 3, б. Реакция фотодегradации с участием необработанных катализаторов $ZnO_{\text{гидр}}-1$ и $ZnO_{\text{гидр}}-2$ и катализатора сравнения ZnO сопровождалась сравнительно небольшим увеличением (на 20–50 %) оптической плотности красителя, измеренной на указанной длине волны. Ни для одного из синтезированных образцов, прошедших плазменную обработку, не наблюдалось снижения $\eta(t)$ МО в процессе облучения. Напротив, относительная оптическая плотность $\eta(t)$ красителя на длине волны 192 нм в присутствии обработанных в плазме образцов $ZnO_{\text{гидр}}-1pl$ и $ZnO_{\text{гидр}}-2pl$ увеличивалась в 3–4 раза. Так как полоса поглощения на длине волны 192 нм является характерной для бензильных групп, изменение ее интенсивности может отражать динамику образования промежуточных продуктов реакции фотодегradации [9].

Реакция разложения органических красителей под действием света на поверхности полупроводниковых катализаторов включает образование радикалов (O^* , O_2^{-*} , OH^*), гидроксильных ионов и ионов водорода (OH^- , H^+), а также перекиси водорода (H_2O_2) вследствие взаимодействия фотоиндуцированных дырок (h^+) и электронов (e^-) с молекулами воды (H_2O) и кислорода (O_2) в результате следующих реакций [6, 11, 12]:



Образованные в ходе вышеуказанных реакций гидроксильные (OH^*) и супероксидные (O_2^{-*}) радикалы в свою очередь участвуют в реакции разложения красителей. В некоторых работах рассматривается другой механизм деградации красителей, в соответствии с которым фотоиндуцированные пары электрон-дырка непосредственно принимают участие в реакции деструкции молекул красителей [6].

Вследствие того, что процесс фотодегradации включает большое число химических реакций с различными промежуточными продуктами, точное математическое описание кинетики реакции достаточно сложно. Однако для практических целей сравнения активности катализаторов, полученных различными способами, используется несколько упрощенных математических моделей. В одной из них предполагается, что в целом реакция фотодегradации является реакцией первого (или псевдопервого) порядка, которую можно описать следующим кинетическим уравнением [6, 13]:

$$\frac{dC}{dt} = -k_1 C. \quad (3)$$

Здесь C – концентрация разлагаемого вещества, k_1 – константа реакции. Решение уравнения (3) может быть представлено в виде

$$C(t) = C_0 e^{-k_1 t}.$$

Таким образом, значение константы реакции первого порядка k_1 можно найти по наклону прямой, аппроксимирующей изменение натурального логарифма нормированной концентрации

$\frac{\ln(C(t))}{C_0}$ во времени:

$$\frac{\ln(C(t))}{C_0} = \ln C_r = -k_1 t. \quad (4)$$

В некоторых случаях более точное описание кинетики реакции достигается при рассмотрении кинетических уравнений половинного порядка [6]:

$$\frac{dC}{dt} = -k_{\frac{1}{2}} C^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Интегральная форма уравнения (5) имеет вид

$$C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}} = -k_{\frac{1}{2}} t. \quad (6)$$

Значение константы реакции половинного порядка $k_{\frac{1}{2}}$ определяется по наклону прямой, аппроксимирующей зависимость $C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}}$ от времени.

На рис. 3, в и 3, г представлены временные зависимости значений $\ln C_r$ и $C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}}$ для реакций фотодегradации метилового оранжевого, протекающих в присутствии синтезированных катализаторов и образца сравнения. Рассчитанные константы скоростей реакций первого k_1 и половинного $k_{\frac{1}{2}}$ порядка и соответствующие коэффициенты корреляции R_1^2 и $R_{\frac{1}{2}}^2$ представ-

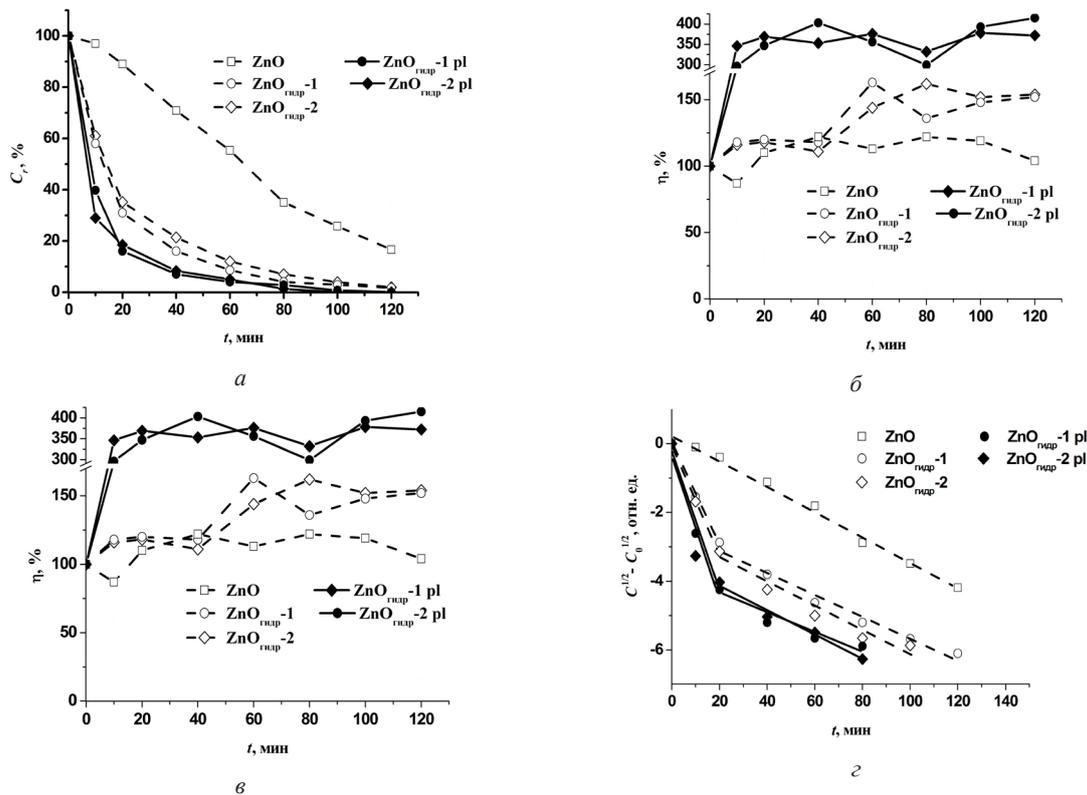


Рис. 3. Фотокаталитическая активность необработанных ($ZnO_{гидр-1}$ и $ZnO_{гидр-2}$, ZnO) и обработанных в плазме ($ZnO_{гидр-1pl}$, $ZnO_{гидр-2pl}$) катализаторов: изменение нормированной концентрации метилового оранжевого C_r , определенной по данным измерений оптической плотности на длине волны 465 нм (а); относительное изменение оптической плотности на длине волны 192 нм $\eta(t)$ (б); временные зависимости значений $\ln C_r$ (в) и $C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}}$ (г)

лены в таблице. Как видно из рис. 3, в и 3, з, зависимости $\ln C_r$ и $C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}}$ для образца сравнения (ZnO) могут быть аппроксимированы одной прямой на протяжении всего времени облучения. Соответствующие константы скорости реакции составляют $k_1 = 2,7 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ и $k_{\frac{1}{2}} = 6,1 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$.

Сравнение коэффициентов корреляции R_1^2 и $R_{\frac{1}{2}}^2$ позволяет сделать вывод о том, что модель реакции половинного порядка точнее описывает кинетику реакции фотодеградациии МО на промышленном катализаторе ZnO.

Скорости реакций первого (k_1) и половинного ($k_{\frac{1}{2}}$) порядка и соответствующие коэффициенты корреляции (R_1^2) и ($R_{\frac{1}{2}}^2$), полученные при интерполяции экспериментальных зависимостей

Катализатор	Реакция первого порядка				Реакция половинного порядка			
	время облучения 0–20 мин		время облучения 20–120 мин		время облучения 0–20 мин		время облучения 20–120 мин	
	$k_1, 10^{-4} \text{ с}^{-1}$	R_1^2	$k_1, 10^{-4} \text{ с}^{-1}$	R_1^2	$k_{\frac{1}{2}}, 10^{-4} \text{ с}^{-1}$	$R_{\frac{1}{2}}^2$	$k_{\frac{1}{2}}, 10^{-4} \text{ с}^{-1}$	$R_{\frac{1}{2}}^2$
ZnO	2,7	0,9871	2,7	0,9871	6,1	0,99621	6,1	0,9962
ZnO _{гидр} -1	9,8	0,9992	5,2	0,9940	23,3	0,9990	5,3	0,9872
ZnO _{гидр} -2	8,7	0,9995	4,5	0,9997	26,1	0,9990	5,7	0,9734
ZnO _{гидр} -1pl	15,3	1,0	4,8	0,9839	35,3	0,9913	4,5	0,9563
ZnO _{гидр} -2pl	14,0	0,9654	5,0	0,9917	33,3	0,9413	6,0	0,9902

В отличие от реакции на образце сравнения, фотодегградация красителя на синтезированных гидротермальным методом катализаторах происходит с различными скоростями. В связи с этим временные зависимости $\ln C_r$ и $C^{\frac{1}{2}}(t) - C_0^{\frac{1}{2}}$ для каждого из катализаторов могут быть аппроксимированы двумя различными прямыми в периоды времени от 0 до 20 мин и от 20 до 120 мин. (рис. 3, в, з).

В течение первых 20 мин облучения фотодегградация протекает достаточно быстро. Так, например, для катализатора ZnO_{гидр}-1 константа скорости, рассчитанная в приближении реакции первого порядка, была в 3,6 раза больше соответствующей константы для образца сравнения и составляла $k_1 = 9,8 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ (см. таблицу). Образец ZnO_{гидр}-2 был менее активен ($k_1 = 8,7 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$). Обработка в плазме способствовала повышению эффективности катализаторов: для обоих образцов константы реакции увеличились примерно в 1,6 раза и составили $15,3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ и $14,0 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ для ZnO_{гидр}-1pl и ZnO_{гидр}-2pl соответственно.

Таким образом, гидротермальным синтезом и последующая обработка в плазме диэлектрического разряда позволяют получить катализатор, активность которого, выраженная в терминах константы реакции, в 5,7 раза превышает по этому показателю промышленный катализатор.

При дальнейшем облучении вплоть до полного разложения красителя (временной интервал 20–120 мин) реакция фотодеградациии протекает медленнее. При этом константы реакции приблизительно одинаковы для всех синтезированных образцов и лежат в диапазоне $(4,5–5,2) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$.

При рассмотрении кинетики фотодеградациии метилового оранжевого в приближении реакции половинного порядка основные тенденции в изменении эффективности катализаторов сохраняются. В начальный период облучения (0–20 мин) синтезированные гидротермальным методом образцы были приблизительно в 4 раза активнее образца сравнения. Константа реакции для наиболее активного катализатора (ZnO_{гидр}-1pl), предварительно обработанного в плазме ($k_{\frac{1}{2}} = 35,3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$), в 5,8 раза превышала константу реакции для образца сравнения. Спустя 20 мин после начала облучения реакция замедлялась. В дальнейшем константы реакции оставались приблизительно одинаковыми для всех синтезированных образцов $((4,5–6,0) \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1})$.

Из сравнения коэффициентов корреляции R_1^2 и $R_{\frac{1}{2}}^2$, полученных при интерполяции кинетических кривых для синтезированных образцов, видно, что модель реакции первого порядка корректнее описывает реакцию фотодеградации.

Отличия фотокаталитической активности материалов, синтезированных различными способами или полученных в результате модификации их физико-химических свойств, как правило, проявляются в изменении их оптических свойств, в частности, в спектрах фотолюминесценции [14–18].

На рис. 4 представлены спектры возбуждения фотолюминесценции и спектры фотолюминесценции синтезированных образцов до и после плазменной обработки, а также образца сравнения. Спектры возбуждения фотолюминесценции получены при регистрации на длине волны 550 нм. Спектр возбуждения образца сравнения ZnO (рис. 4, а) имеет два неярко выраженных максимума вблизи длин волн ~290 и ~350 нм. В спектрах возбуждения синтезированных образцов, как исходных, так и подвергнутых плазменной обработке, наблюдается максимум в диапазоне 275–280 нм, а также два частично перекрывающихся пика с различной интенсивностью в области 390 и 445 нм – для образцов ZnO_{гидр}-1 и ZnO_{гидр}-1pl и 330 и 410 нм – для образцов ZnO_{гидр}-2 и ZnO_{гидр}-2pl (рис. 4, б, в). Регистрация спектров фотолюминесценции проводилась при возбуждении на длине волны 330 нм.

В спектрах люминесценции образца сравнения ZnO наблюдаются два максимума: первый – в ближней ультрафиолетовой области с максимумом вблизи 385 нм, второй, доминирующий, – в видимой области вблизи 530 нм. Интенсивность излучения I в видимой части спектра почти в 5 раз превосходит интенсивность излучения в ультрафиолете. Максимум в области 385 нм (прямой межзонный переход) связан с экситонной рекомбинацией и относится к ближнему краевому излучению вблизи запрещенной зоны [19, 20]. Фотолюминесценция в видимой области вызвана рекомбинацией фотоиндуцированных электронов и дырок через уровни, лежащие

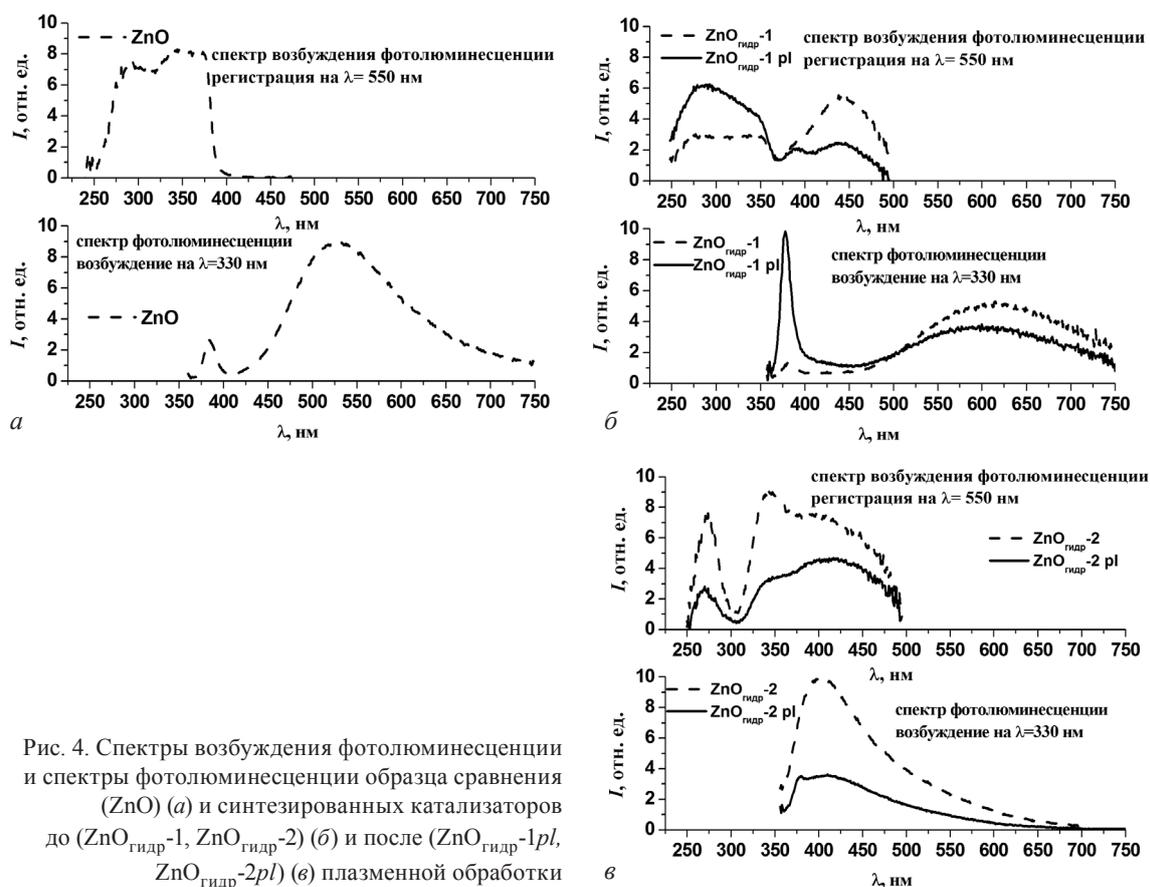


Рис. 4. Спектры возбуждения фотолюминесценции и спектры фотолюминесценции образца сравнения (ZnO) (а) и синтезированных катализаторов до (ZnO_{гидр}-1, ZnO_{гидр}-2) (б) и после (ZnO_{гидр}-1pl, ZnO_{гидр}-2pl) (в) плазменной обработки

в запрещенной зоне и определяемые наличием дефектов: вакансиями кислорода или цинка. При этом люминесценция в синей области (приблизительно около 435 нм) связана с наличием дефектов, обусловленных наличием цинка в междоузлиях. Фотолюминесценция в области 500–550 нм связана с переходами с донорных уровней, образованных вакансиями кислорода, и с поверхностными дефектами [21–24]. Наличие последних приводит к уменьшению фотолюминесценции, так как они увеличивают интенсивность безызлучательных переходов [25].

Как видно из рис. 4, б, спектр фотолюминесценции синтезированного образца $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-1$ до и после плазменной обработки также имеет два максимума: вблизи 380 и 600 нм. Для необработанного образца значение I в видимой области примерно в 4 раза больше значения в пике, наблюдаемом в ультрафиолете. После плазменной обработки интенсивность в пиках перераспределяется, при этом фотолюминесценция в УФ-области становится более интенсивной.

Спектр фотолюминесценции катализатора $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-2$ имеет один максимум вблизи 400 нм, интенсивность которого уменьшается после плазменной обработки ($\text{ZnO}_{\text{гидр}}-2pl$) почти в 3 раза (рис. 4, в). Более того, в спектре обработанного катализатора появляется небольшой провал в области 390 нм. Таким образом, можно предположить, что профиль интенсивности фотолюминесценции в области 400 нм формируется в результате наложения двух пиков вблизи 380 и 410 нм.

Сдвиг максимума интенсивности ближней фотолюминесценции синтезированных образцов (380 нм) в область более высоких энергий по отношению к образцу сравнения (386 нм) может быть обусловлен примесной энергетической зоной, создаваемой атомами Al, которые являются донорами [26]. Уменьшение интенсивности фотолюминесценции в видимой области для образцов $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-1pl$ и $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-2pl$ по сравнению с образцами $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-1$ и $\text{ZnO}_{\text{гидр}}-2$ может быть связано с уменьшением дефектов на поверхности катализатора в процессе плазменной обработки [25].

Связь интенсивности фотолюминесценции в видимой области и фотокаталитической активности полупроводниковых катализаторов определяется в большой степени свойствами допирующих атомов и структуры катализатора и не является однозначной: в некоторых случаях может наблюдаться уменьшение люминесценции при повышении фотокаталитической активности, в других, наоборот, повышение активности катализатора может сопровождаться повышением интенсивности фотолюминесценции [25]. Для синтезированных в условиях нашего эксперимента материалов повышение фотокаталитической активности после плазменной обработки сопровождалось уменьшением фотолюминесценции на длинах волн больше 450 нм.

Заключение. В настоящей работе фотокатализаторы на основе оксида цинка (ZnO) с различным содержанием допирующих атомов Al (2 и 4 ат.%) получены гидротермальным методом. Показано, что изменение концентрации допирующих атомов приводит к изменению морфологии синтезированных порошков. Исследование каталитической активности синтезированных образцов, выполненное на модельной реакции разложения метилового оранжевого ($\text{C}_{14}\text{H}_{14}\text{N}_3\text{NaO}_3\text{S}$) в водном растворе под действием УФ-излучения, не выявило существенных различий их фотокаталитических свойств. Константы скорости реакции, рассчитанные в приближении реакции первого порядка, составили $9,8 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ и $8,7 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, что более чем в 3 раза превышает константы реакции с участием образца сравнения ($2,7 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$). Показано, что обработка катализаторов в плазме диэлектрического барьерного разряда в воздухе при нормальном давлении увеличивает эффективность реакции фотодеградации метилового оранжевого на 60 % по сравнению с необработанными образцами. Таким образом, гидротермальный синтез и последующая обработка в плазме диэлектрического разряда позволяет получить катализатор, активность которого, выраженная в терминах константы реакции, в 5,7 раза превышает интенсивность промышленного катализатора. Повышение фотокаталитической активности сопровождалось уменьшением фотолюминесценции обработанных в плазме катализаторов в диапазоне длин волн $\lambda > 450 \text{ нм}$.

Полученные в работе результаты свидетельствуют о возможности использования для синтеза высокоэффективных фотокатализаторов гидротермального метода и последующей обработки катализаторов в плазме диэлектрического барьерного разряда.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф14КАЗ-004).

Список использованной литературы

1. Environmental applications of semiconductor photocatalysis / M. R. Hoffmann [et al.] // Chem. Rev. – 1995. – Vol. 95, N 1. – P. 69–96.
2. Recent developments of zinc oxide based photocatalyst in water treatment technology: A review / K. M. Lee [et al.] // Water Research. – 2016. – Vol. 88, N 1. – P. 428–448.
3. Kansal, S. K. Studies on photodegradation of two commercial dyes in aqueous phase using different photocatalysts / S. K. Kansal, M. Singh, D. Sud // J. of Hazardous Materials. – 2007. – Vol. 141, N 3. – P. 581–590.
4. Amadelli, R. Photoelectrocatalysis for water purification, in photocatalysis and water purification : From Fundamentals to Recent Applications / R. Amadelli, L. Samiolo; ed. P. Pichat. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2013.
5. Meng, Z. Wastewater treatment by photocatalytic oxidation of nano-ZnO [Electronic resource] / Z. Meng, Zh. Juan // Global Environmental Policy in Japan. – 2008. – N 12. – P. 1–9. – Mode of access: http://c-faculty.chuo-u.ac.jp/~hiroshig/GEPJ12_ZhaoandZhang.pdf. – Date of access: 04.01.2016.
6. Moore, C. J. Photocatalytic activity and stability of porous polycrystalline ZnO thin-films grown via a two-step thermal oxidation process / C. J. Moore, R. Louder, V. C. Thompson // Coatings. – 2014. – Vol. 4, N 3. – P. 651–669.
7. Min Guo. Hydrothermal growth of well-aligned ZnO nanorod arrays: Dependence of morphology and alignment ordering upon preparing conditions / Min Guo, Peng Diao, Shengmin Cai. // J. Solid State Chem. – 2005. – Vol. 178. – P. 1864–18.
8. Comparative study of the effect of RF and dbd plasma treatment on a photocatalytic activity of ZnO-based catalysts / I. I. Filatova [et al.] // High Temp. Mater. Processes. – 2015. – N 3/4. – P. 221–230
9. He, H. Y. Photo-catalytic degradation of Methyl Orange In water on CuS-Cu₂S Powders / H. Y. He // Int. J. Environ. Res. – 2008. – Vol. 2. – P. 23–26.
10. Absorption and fluorescence spectra of methyl orange in aqueous solutions / M. Giri [et al.] // Atti della “Fondazione Giorgio Ronchi”. – 2012. – Vol. 67. – P. 255–261.
11. Fujishima, A. Titanium dioxide photocatalysis / A. Fujishima, T. N. Rao, D. A. Tryk // J. Photochem. Photobiol., C: Photochem. Rev. – 2000. – Vol. 1, N 1. – P. 1–21.
12. Carp, O. Photoinduced reactivity of titanium dioxide / O. Carp, C. L. Huisman, A. Reller // Prog. Solid State Chem. – 2004. – Vol. 32, N 1. – P. 33–177.
13. Photocatalytic discoloration of methyl orange and Indigo carmine on TiO₂ (P25) deposited on conducting substrates: effect of H₂O₂ and S₂O₈²⁻ / T. Kodom [et al.] // Int. J. Chem. Technol. – 2012. – Vol. 4, N 2. – P. 45–56.
14. Relationships of surface oxygen vacancies with photoluminescence and photocatalytic performance of ZnO nanoparticles / J. Liqiang [et al.] // Sci. China, Ser. B: Chemistry. – 2005. – Vol. 48, N 1. – P. 25–28.
15. The effect of calcination temperature on the surface microstructure and photocatalytic activity of TiO₂ thin films prepared by liquid phase deposition. / Yu. Jia-Guo [et al.] // J. Phys. Chem. B. – 2003. – Vol. 107, N 50. – P. 13871–13879.
16. Review of photoluminescence performance of nano-sized semiconductor materials and its relationships with photocatalytic activity / J. Liqiang [et al.] // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2006. – Vol. 90. – P. 1773–1787.
17. Photocatalytic activity of WO_x-TiO₂ under visible light irradiation / X. Z. Li [et al.] // J. Photochem. Photobiol., A: Chemistry. – 2001. – Vol. 141. – P. 209–217.
18. The preparation and characterization of La doped TiO₂ nanoparticles and their photocatalytic activity / J. Liqiang [et al.] // J. Solid State Chem. – 2004. – Vol. 177, N 10. – P. 3375–3382.
19. Морфологические и оптические особенности нанотетрапедов ZnO / С. А. Аль Рифаи [и др.] // Конденсир. среды и межфаз. границы. – 2013. – Т. 15, № 3. – С. 317–321.
20. Effect of hydrogen plasma treatment on the luminescence and photoconductive properties of ZnO nanowires / Y. Li [et al.] // Mater. Res. Soc. Symp. Proc. – 2010. – Vol. 1206. – P. 1206-M13-03P1–1206-M13-03P6.
21. Djurišić, A. B. ZnO nanostructures for optoelectronics: material properties and device applications / A. B. Djurišić, A. M. C. Ng, X. Y. Chen // Prog. Quant. Electron. – 2010. – Vol. 34. – P. 191–259.
22. Optical properties of thin films of ZnO prepared by pulsed laser deposition / J. A. Sans [et al.] // Thin Solid Films. – 2004. – Vol. 453. – P. 251–255.
23. Growth mechanism and properties of ZnO nanorods synthesized by plasma-enhanced chemical vapor deposition / X. Liu [et al.] // J. Appl. Phys. – 2004. – Vol. 95. – P. 3141–3147.
24. Shalish, I. Size-dependent surface luminescence in ZnO nanowires / I. Shalish, H. Temkin, V. Narayanamurti // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69. – P. 1–4.
25. Optical properties of ZnO nanoparticles capped with polymers / Sh. Tachikawa [et al.] // Materials. – 2011. – Vol. 4. – P. 1132–1143.
26. Оптические свойства исходных и облученных пленок оксида цинка / А. В. Мудрый [и др.] // Взаимодействие излучений с твердым телом: материалы 7-й междунар. конф., Минск, 26–28 сент. 2007 г. / Изд. центр БГУ; редкол. В. М. Анищик (отв. ред.) [и др.]. – Минск, 2007. – С. 137–139.

Поступила в редакцию 20.05.2016

УДК 537.9

*Е. А. ЛЕВЧУК, Л. Ф. МАКАРЕНКО***ВЛИЯНИЕ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЛОКАЛИЗАЦИЮ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНА В СИСТЕМЕ НАНОЗАТВОР–ДОНОР***Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь,
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by*

Проведено численное моделирование влияния магнитного поля на состояния мелкого донора, находящегося во внешнем электрическом поле дискообразного затвора. Для расчета энергий и волновых функций связанного электрона использовался метод конечных элементов. Получены характеристики, определяющие изменение локализации волновой функции основного состояния электрона в рассматриваемой системе, в зависимости от величины магнитного поля.

Ключевые слова: мелкий донор, нанозатвор, энергетический уровень, критический потенциал, энергетический зазор, численное моделирование.

*E. A. LEVCHUK, L. F. MAKARENKO***EFFECT OF A MAGNETIC FIELD ON ELECTRON WAVE FUNCTION RELOCATION IN NANOGATE–DONOR SYSTEM***Belarusian State University, Minsk, Belarus,
e-mail: liauchuk.alena@gmail.com, makarenko@bsu.by*

Numerical modeling of magnetic field effect on the states of shallow donor, affected by external electric field of a disc-shaped gate, is carried out. Bound electron energies and wave functions are calculated using the finite element method. Characteristics of relocation of the ground state wave function from the donor to the gate are obtained as a function of magnetic field.

Keywords: shallow donor, nanogate, energy level, critical potential, energy gap, numerical modeling

Введение. Донорные примеси вблизи поверхности полупроводника, находящиеся под действием электрического и магнитного полей, могут использоваться как базовые элементы для построения квантового компьютера [1]. Однородное магнитное поле в этом случае необходимо для реализации спинового кубита, а также может применяться в качестве дополнительного управляющего параметра для контроля локализации электрона в системе донор–управляющий электрод (затвор) и степени перекрытия электронных волновых функций соседних кубитов [2].

Несмотря на большое число работ, посвященных моделированию состояний водородоподобного атома в однородном магнитном поле (см. обзор [3] и ссылки в нем), состояния донора, находящегося вблизи поверхности полупроводника под действием как электрического, так и магнитного полей, изучены все еще недостаточно. В статье [4] с помощью вариационного метода и метода конечных элементов исследовались состояния донора в магнитном поле вблизи поверхности полупроводника, но без учета электрического поля. Влияние и электрического, и магнитного полей на электронные состояния донора изучалось в работах [2, 5] с помощью вариационного метода. Однако внешнее электрическое поле в этих работах полагалось однородным, в то время как для более реалистичного моделирования системы требуется рассматривать неоднородное электрическое поле, созданное затвором конечных размеров. Влияние электрического поля такого типа рассматривалось в [6, 7], где, однако, не учитывалось наличие магнитного поля.

Целью данной работы является исследование задачи, возникающей при приложении внешнего магнитного поля к мелкому донору, находящемуся как в неоднородном электрическом поле на-

норазмерного затвора, так и в однородном электрическом поле. Основная характеристика, определяющая изменение локализации (передислокацию) волновой функции донорного электрона в подзатворную область в первом случае, – это критический потенциал на затворе Φ_{0C} [6], во втором случае – критическое поле F_C [2, 5]. Другой характеристикой является минимальная величина энергетического зазора (g_{\min}) между основным и первым возбужденным состояниями электрона, которая позволяет оценить время туннелирования электрона от донора к затвору [5, 8].

1. Постановка задачи. Будем рассматривать одиночный атом мелкого донора, расположенный вблизи поверхности полупроводника ($z = 0$) в области $z > 0$ на оси Oz . Расстояние от донора до поверхности полупроводника обозначим через z_0 . Электрическое поле в полупроводнике создается расположенным на его поверхности тонким дискообразным затвором, имеющим диаметр d . Потенциал затвора обозначим через Φ_0 .

Ограничимся рассмотрением случая, когда внешнее однородное магнитное поле B направлено вдоль оси Oz . Тогда в рамках приближения эффективной массы состояния электрона описываются стационарным уравнением Шредингера для огибающей функции Ψ и энергии E , которое в безразмерной форме имеет вид

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\mu^2 \rho^2}{4} + \hat{V}_D + \hat{V}_G \right) \Psi = E \Psi, \quad \rho > 0, z > 0, \quad (1)$$

где \hat{V}_D – оператор кулоновского взаимодействия электрона и донора:

$$\hat{V}_D = -\frac{2}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}}, \quad (2)$$

\hat{V}_G – оператор потенциальной энергии электрона во внешнем электрическом поле. Аналитическое выражение для оператора \hat{V}_G приведено в [9, 10]. Уравнение (1) соответствует рассмотрению состояний с нулевым орбитальным моментом, что является достаточным для вычисления критического потенциала. Кроме этого, в уравнении (1) мы пренебрегаем вкладом потенциала изображения, поскольку, как показано в [9], заряды изображения не влияют на качественное поведение характеристик рассматриваемой системы. В качестве параметров безразмеривания используется эффективный борковский радиус $a^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon_s \hbar^2 / m^* e^2$ для длины, а для энергий – эффективный Ридберг $Ry^* = m^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon_s^2$.

В уравнение (1) входит безразмерное значение магнитного поля μ , определяемое выражением

$$\mu = \frac{(a^*)^2}{\lambda_B^2} = \frac{B}{B_0}, \quad (3)$$

где магнитная длина определяется как $\lambda_B = (\hbar / Be)^{1/2}$, а характеристическое магнитное поле B_0 как

$$B_0 = 2,35 \cdot 10^5 \left(\frac{m^*}{m_0} \right)^2 \frac{1}{\epsilon_s^2} \text{ Тл.}$$

Кроме того, будем считать, что между затвором и полупроводником находится слой диэлектрика с бесконечно малой толщиной, создающий бесконечно высокий потенциальный барьер на границе, что приводит к граничному условию

$$\Psi|_{z=0} = 0. \quad (4)$$

Для связанных состояний также должны выполняться условия на бесконечности:

$$\Psi \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \rho \rightarrow \infty, z \rightarrow \infty. \quad (5)$$

2. Результаты численных расчетов. Уравнение (1) с граничными условиями (4)–(5) решалось с помощью метода конечных элементов (МКЭ). При этом неограниченная область $\rho > 0$, $z > 0$, на которой задано уравнение (1), заменялось ограниченной областью $0 < \rho < L_\rho$, $0 < z < L_z$, а волновая функция аппроксимировалась с помощью кусочно-линейных пробных функций на треугольной сетке. Величины L_ρ и L_z выбирались из условия минимума энергии рассчитываемого состояния (как основного, так и возбужденных).

Поскольку все предыдущие исследования влияния магнитного поля на изменение локализации электрона вблизи поверхности полупроводника проводились, предполагая внешнее электрическое поле однородным, то желательно включить в последующее рассмотрение и этот случай. В нашей модели однородное электрическое поле является предельным случаем большого диаметра затвора, когда $d \rightarrow \infty$. Таким образом, в дальнейшем будем рассматривать как затвор конечного диаметра, так и затвор, занимающий всю плоскость xOy .

Переход от конечного затвора к бесконечному требует учета нескольких качественных различий. Во-первых, для случая затвора бесконечной площади (однородное электрическое поле) возникает проблема выбора нулевого уровня отсчета потенциала. Если для затвора конечной площади естественным является выбор нулевого потенциала на бесконечности, то, очевидно, это становится невозможным при $d \rightarrow \infty$. Как показано в [9], локализация волновой функции определяется не абсолютной величиной потенциала на затворе, а разностью потенциалов на затворе и в точке расположения донора $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0, z_0)$ (здесь $\Phi(\rho, z)$ – распределение потенциала затвора в полупроводнике). Это позволяет сравнивать результаты расчетов для конечного и бесконечного затворов, если в обоих случаях мы условимся выбирать нулевой уровень потенциала внешнего электрического поля в точке расположения донора. Тогда в случае однородного поля потенциал будет определяться выражением

$$\hat{V}_G = -\frac{\Delta\Phi}{z_0}(z_0 - z), \quad (6)$$

а в случае затвора конечных размеров переопределим потенциал как

$$\tilde{\Phi}(\rho, z) = \Phi(\rho, z) - \frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{d}{2z_0}. \quad (7)$$

Аналогично, вместо критического потенциала Φ_{0c} рассматривается критическая разность потенциалов $\Delta\Phi_c$. Такое переопределение потенциала внешнего поля для конечного затвора приводит лишь к необходимости пересчета значений энергии по формуле

$$\tilde{E} = E + \frac{2\Phi_0}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{d}{2z_0}. \quad (8)$$

При этом ход зависимостей уровней энергии от управляющего потенциала несколько изменяется, но разности между уровнями и, следовательно, положение точек квазипересечения (кривые 2, 2' и 3, 3' на рис. 1) остаются неизменными.

Как видно из рис. 1, при выборе нулевого уровня потенциала на бесконечности увеличение значения Φ_0 приводит к существенному понижению энергии основного состояния электрона, связанного с донором (E_{D0}). При использовании же в качестве потенциальной энергии $\tilde{\Phi}(\rho, z)$ мы наблюдаем лишь незначительные изменения E_{D0} . То есть практически все наблюдаемое понижение энергии основного состояния до точки квазипересечения было связано со вторым слагаемым в равенстве (8), а кинетическая энергия связанного с донором электрона изменяется очень мало.

Для конечного затвора (кривые 2, 2' и 3, 3', 3'' на рис. 1) хорошо видны изломы, соответствующие точкам квазипересечения энергетических уровней. После прохождения точек квазипересечения изменяется структура волновых функций, соответствующих близким уровням энергии. Точка B на кривых 2, 2' определяет критический потенциал, соответствующий передислокации

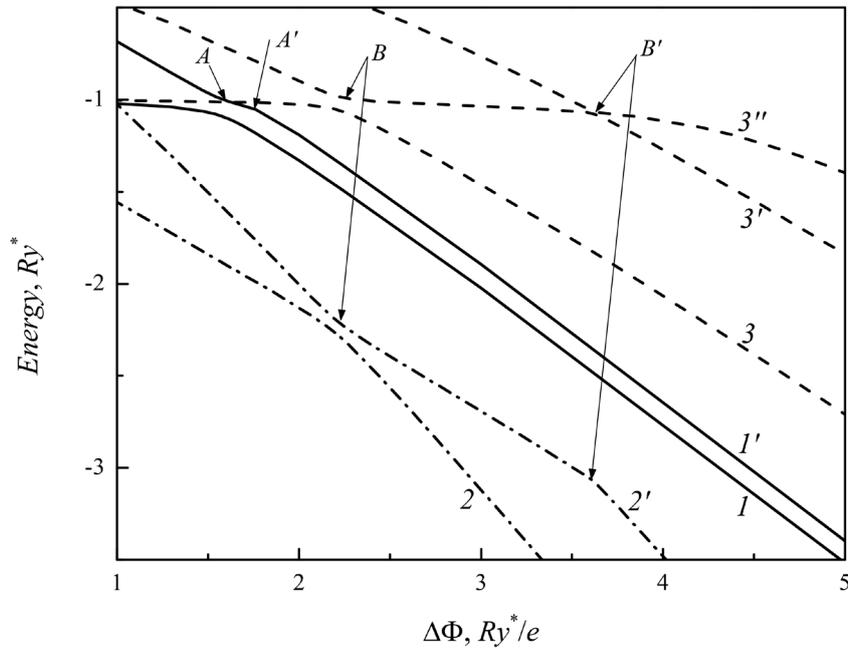


Рис. 1. Энергии основного (кривые 1, 2, 3), первого (кривые 1', 2', 3') и второго (кривая 3'') возбужденных состояний электрона в системе донор–затвор в зависимости от разности потенциалов $\Delta\Phi = \Phi_0 - \Phi(0, z_0)$. Кривые 1, 1' представляют энергии при однородном внешнем электрическом поле, кривые 2, 2', 3, 3', 3'' – энергии при диаметре затвора $d = 10a^*$. Кривые 2, 2' соответствуют случаю, когда нулевой уровень потенциала затвора выбирается на бесконечности, кривые 3, 3', 3'' – когда нулевой уровень потенциала затвора выбирается на доноре. Расстояние от донора до затвора $z_0 = 8a^*$

волновой функции от донора к затвору. В следующей точке B' происходит квазипересечение уровней энергии $1s$ -состояния вблизи донора и 2σ -состояния вблизи затвора.

Аналогичная картина наблюдается и в случае бесконечного затвора при достаточно больших значениях z_0 , однако при значениях z_0 , представляющих интерес для исследования, она приобретает более сложный вид. Как видно из рис. 1, при $z_0 = 8a^*$ область квазипостоянного значения E_1 между соседними точками A и A' (кривые 1, 1') практически отсутствует. При меньших значениях z_0 нахождение точки квазипересечения становится весьма затруднительным. В этом случае возникают проблемы с определением критического потенциала по нахождению точки с минимальным значением зазора g_{\min} , как это делалось ранее в работах [2, 5]. Также с уменьшением z_0 становится невозможно и само определение понятия минимального зазора. При таких значениях z_0 происходит плавная передислокация волновой функции связанного электрона от донора к затвору [6]. В дальнейшем мы будем рассматривать только такие значения z_0 , при которых еще можно пользоваться понятием минимального зазора g_{\min} .

Кривые 3, 3' на рис. 1 показывают, что $\Delta\Phi_c$ в отсутствие магнитного поля можно найти как точку пересечения кривой энергии основного состояния вблизи затвора и кривой энергии основного состояния изолированного донора (т. е. $E = -1Ry^*$) [9]. Аналогичное справедливо и для $\mu > 0$, однако тогда энергия основного состояния изолированного донора зависит от величины магнитного поля. Поэтому исследуем отдельно связанные состояния в квантовой яме, создаваемой полем затвора при $z_0 \rightarrow \infty$. Такую систему можно рассматривать как изолированную электрически индуцированную квантовую точку. Стационарное уравнение Шредингера для такого объекта будет совпадать с уравнением (1), в котором предполагается, что $\hat{V}_D = 0$.

Наличие магнитного поля приводит к «сжатию» волновых функций рассматриваемой системы в плоскости, перпендикулярной направлению магнитного поля, что, в свою очередь, увеличивает энергию основного состояния (рис. 2). Как следует из рисунка, скорость изменения E_0 с ростом магнитного поля зависит от диаметра затвора. Это приводит к тому, что при значениях

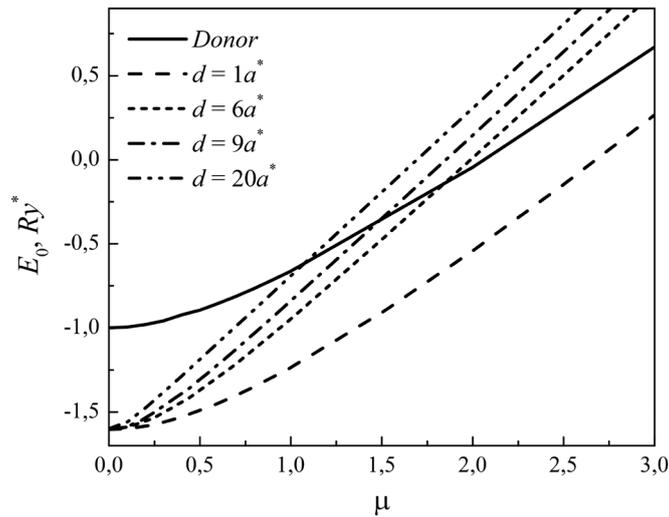


Рис. 2. Изменение энергии основного состояния электрона в электрически индуцированной квантовой точке с ростом величины магнитного поля (пунктирные кривые) для различных диаметров затвора; сплошная кривая соответствует энергии основного состояния электрона в поле изолированного донора [11]

потенциала на затворе, незначительно превышающих критическое значение, включение магнитного поля может приводить к обратной передислокации волновой функции электрона от затвора к донору, что показано на рис. 3. Этот эффект становится более заметным при возрастании диаметра затвора.

На рис. 4 приведены результаты расчетов исследования влияния магнитного поля на $\Delta\Phi_C$ и g_{\min} при конечном z_0 для различных значений диаметра затвора. Как видно, критическая разность потенциалов монотонно увеличивается с ростом магнитного поля, причем скорость увеличения $\Delta\Phi_C$ практически не зависит от диаметра затвора при $d \geq 6a^*$.

В то же время в этом интервале значений диаметра затвора наблюдается качественное изменение хода g_{\min} с увеличением поля. Если для меньших значений диаметра имеет место монотонное уменьшение g_{\min} , то при увеличении d в области $0 < \mu < 1$ может происходить увеличение g_{\min} . Наиболее сильно немонотонность зависимости $g_{\min}(\mu)$ наблюдается для случая $d \rightarrow \infty$.

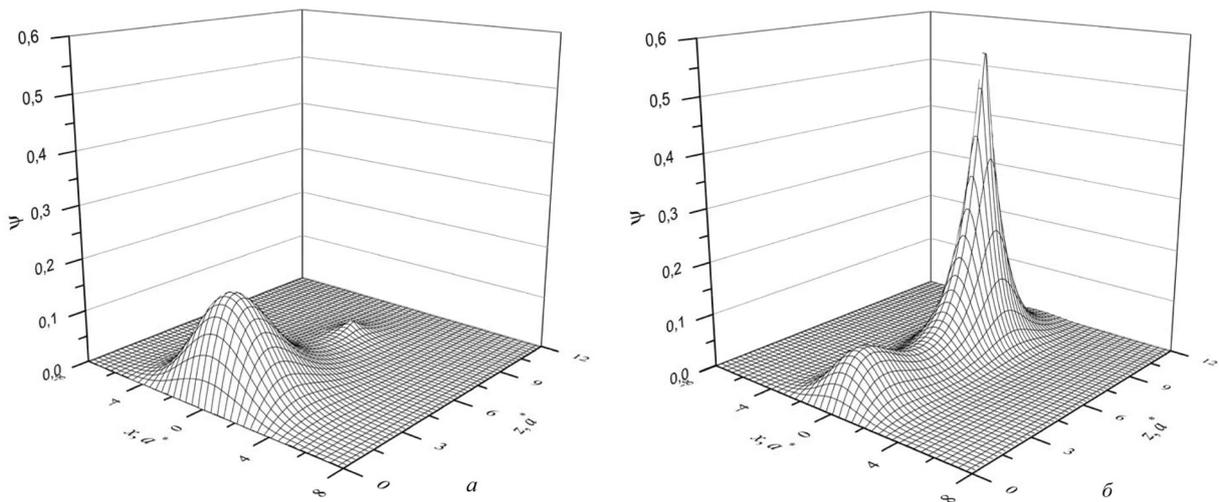


Рис. 3. Изменение локализации волновой функции основного состояния электрона при включении магнитного поля: приведены нормированные волновые функции для диаметра затвора $d = 6a^*$, расположения донора в точке $z_0 = 8a^*$ и потенциала на затворе $\Phi_0 = 4,5 Ry^*/e$ в отсутствие магнитного поля (а) и при приложении магнитного поля, соответствующего $\mu = 1$ (б)

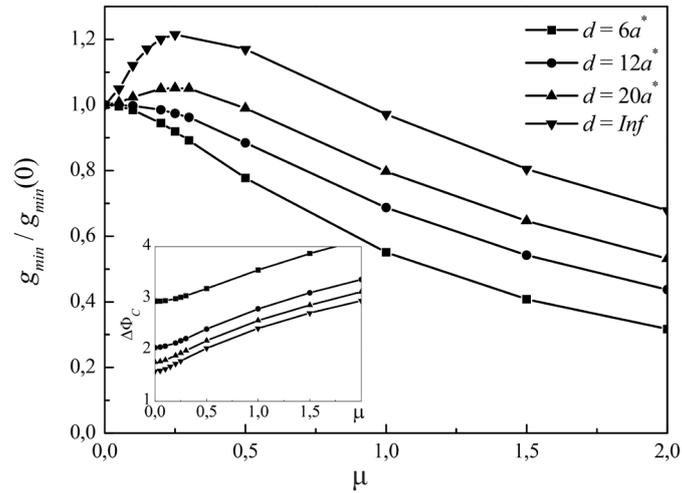


Рис. 4. Энергетический зазор между основным и первым возбужденным состояниями (g_{\min}) в зависимости от величины магнитного поля для различных диаметров затвора; расстояние между донором и затвором составляет $z_0 = 8a^*$; значение g_{\min} нормировано на величину энергетического зазора при нулевом магнитном поле ($g_{\min}(0)$). На вставке – зависимость критической разности потенциалов от магнитного поля для соответствующих значений d

Увеличение $\Delta\Phi_C$ легко объяснимо на основании данных, приведенных на рис. 2, где видна разница между скоростями увеличения энергий основного состояния электрона, локализованного на доноре, и в электрически индуцированной квантовой точке. Немонотонность изменения g_{\min} , по-видимому, связана с влиянием магнитного поля на локализацию волновых функций этих состояний.

3. Вариационный расчет влияния магнитного поля на критические параметры. Как было показано в [9], зависимости E_0 и E_1 от Φ_0 для затвора конечных размеров хорошо воспроизводятся вариационным методом с использованием пробных функций вида

$$\Psi_{DG0} = C_D \Psi_{D0} + C_G \Psi_{G0}. \quad (9)$$

Представление пробной функции в виде (9) использовалось ранее для расчетов критических параметров также и для случая однородного электрического поля [2, 5].

Сравнение с результатами, полученными методом МКЭ, показало, что функция Ψ_{D0} при не слишком малых значениях z_0 ($z_0 \geq 4-5a^*$) во внешнем электрическом поле хорошо аппроксимируется суммой

$$\Psi_{D0} = A_1 \exp(-r) + A_2 z \exp(-r). \quad (10)$$

Коэффициенты A_1 и A_2 зависят от величины внешнего электрического поля вблизи донора и являются вариационными параметрами. В работах [2, 5] в качестве Ψ_{D0} использовался лишь второй член в правой части равенства (10). Однако очевидно, что этот член неправильно описывает характер зависимости донорной волновой функции при приложении внешнего электрического поля.

Вид функции Ψ_{G0} для затвора конечных размеров определялся в [9] путем сравнения с результатами расчетов МКЭ. Было найдено, что результаты расчетов E_0 и E_1 методом МКЭ хорошо воспроизводятся при выборе пробной функции Ψ_{G0} в виде

$$\Psi_{G0}(\rho, z) = N_G z \left(e^{-\alpha_1 \rho^2 - \beta_1 z^2} + C_r e^{-\alpha_2 \rho^2 - \beta_2 z^2} \right), \quad (11)$$

где выражения для зависимостей параметров α_i , β_i , C_r от Φ_0 описаны ранее в работе [9].

Для выбора оптимального вида функции ψ_{G0} в случае однородного электрического поля была использована аналогичная процедура сравнения результатов расчета стандартным вариационным методом с результатами расчетов с помощью МКЭ. Поиск ψ_{G0} проводился среди функций вида

$$\psi_{l_1 l_2} = z^{l_1} \exp(-\beta z^{l_2} - \gamma \rho^2). \quad (12)$$

Оказалось, что для расчета энергий наиболее удачными будут значения параметров $l_1 = 1$ и $l_2 = 2$. В работах [2, 5] для расчета $\Delta\Phi_C$ и g_{\min} используются другие значения $l_1 = 2$ и $l_2 = 1$, которые, однако, приводят к более высоким погрешностям при вычислении значений E_1 (и, следовательно, g_{\min}). Отметим также, что разница между результатами расчетов стандартным вариационным методом и методом МКЭ для однородного поля существенно уменьшается, если в качестве ψ_{G0} взять сумму из двух функций вида (12), т. е. когда ψ_{G0} имеет такой же вид, как и в случае конечного затвора, но вариационные параметры α_i , β_i , C_r для случая бесконечного затвора требуют нового определения.

Изменение волновой функции при приложении магнитного поля хорошо описывается умножением обоих слагаемых (9) ψ_{D0} и ψ_{G0} на множитель вида $\exp(-\kappa\rho^2)$, как это было предложено для изучения влияния магнитного поля на основное состояние изолированного донора в объеме полупроводника [12]. То есть при наличии магнитного поля результирующую пробную функцию можно представить в виде

$$\psi_{\mu} = C_D \psi_{D0} \exp(-\kappa_D \rho^2) + C_G \psi_{G0} \exp(-\kappa_G \rho^2). \quad (13)$$

Параметры κ_D и κ_G могут быть определены независимо друг от друга. Для определения параметра κ_D достаточно рассмотреть изолированный донор в объеме полупроводника. А для определения κ_G можно использовать результаты расчетов в случае $z_0 \rightarrow \infty$. При этом κ_G в общем случае зависит от диаметра затвора и его потенциала, а для однородного поля – только от расстояния от донора до поверхности.

Использование функции (13) позволяет с небольшой погрешностью воспроизвести результаты расчета энергии (см. рис. 4) методом конечных элементов. Кроме этого их можно использовать для качественного анализа закономерностей функционирования кубита, предложенного в работе [1].

Заключение. В работе приведены результаты численного моделирования влияния магнитного поля на состояния электрона, который находится в электрическом поле, создаваемом кулоновским центром и дискообразным затвором. Изучено влияние магнитного поля на характеристические параметры, определяющие передислокацию волновой функции электрона от донора к затвору. На основании результатов численных расчетов с помощью метода конечных элементов предложены пробные функции для вариационного метода, которые позволяют с достаточной точностью рассчитать не только критический потенциал, но и величину энергетического зазора, определяющего скорость туннелирования от донора к затвору. Показано, что для больших размеров затвора имеет место немонотонная зависимость величины энергетического зазора между основным и первым возбужденным состояниями системы от магнитного поля.

Список использованной литературы

1. Kane, B. E. A silicon-based nuclear spin quantum computer / B. E. Kane // Nature (London). – 1998. – Vol. 393. – P. 133–137.
2. Calderon, M. J. Quantum control of donor electrons at the Si-SiO₂ interface / M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Phys. Rev. Lett. – 2006. – Vol. 96. – 096802.
3. Лисица, В. С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода / В. С. Лисица // Успехи физ. наук. – 1987. – Т. 153, № 11. – С. 379–421.

4. Effect of a perpendicular magnetic field on the shallow donor states near a semiconductor-metal interface / Bin Li [et al.] // Phys. Rev. B. – 2013. – Vol. 87. – 075313.
5. Calderon, M. J. External field control of donor electron exchange at the Si/SiO₂ interface / M. J. Calderon, B. Koiller, S. Das Sarma // Phys. Rev. B. – 2007. – Vol. 75. – 125311.
6. Gate-induced ionization of single dopant atoms / G. D. J. Smit [et al.] // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – 193302.
7. Numerical study of hydrogenic effective mass theory for an impurity P donor in Si in the presence of an electric field and interfaces / L. M. Kettle [et al.] // Phys. Rev. B. – 2003. – Vol. 68. – 075317.
8. Martins, A. S. Electric-field control and adiabatic evolution of shallow donor impurities in silicon / A. S. Martins, R. B. Capaz, B. Koiller // Phys. Rev. B. – 2004. – Vol. 69. – 085320.
9. Левчук, Е. А. Управление электронными состояниями мелкого донора при помощи металлического затвора конечных размеров / Е. А. Левчук, Л. Ф. Макаренко // Физика и техника полупроводников. – 2016. – Т. 50, № 1. – С. 89–96.
10. Смайт, В. Электростатика и электродинамика / В. Смайт. – М.: Изд-во иностр. лит., 1954.
11. Praddaude, H. C. Energy levels of hydrogenlike atoms in a magnetic field / H. C. Praddaude // Phys. Rev. A. – 1972. – Vol. 6, N 4. – P. 1321–1324.
12. Показилов, Е. П. Вариационный расчет энергетических уровней водородоподобной системы в магнитном поле / Е. П. Показилов, М. М. Русанов // Физика твердого тела. – 1968. – Т. 10, № 10. – С. 3117–3119.

Поступила в редакцию 20.04.2016

UDC 535.21;535.3

*S. A. BATISHCHE¹, S. B. BUSHUK¹, A. A. KOUZMOUK¹, A. V. SAVITCH¹, H. A. TATUR¹,
G. GRABNER², W. KAUTEK³*

ESTIMATION OF CORNEA EFFECTIVE ABSORPTION COEFFICIENT AT 213 NM FROM ABLATION MEASUREMENTS

¹*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: batis@dragon.bas-net.by*

²*Paracelsus Medical University, University Eye Clinic, Salzburg, Austria,
e-mail: G.Grabner@salk.at*

³*University of Vienna, Department of Physical Chemistry, Vienna, Austria,
e-mail: wolfgang.kautek@univie.ac.at*

It is shown experimentally that a cornea represents a 213 nm UV inhomogeneous material both at depth and around a surface in relation to UV effective absorption coefficient and local laser depth ablation rate, which should be taken into account for a more exact planning of a profile of removed cornea collagen material during eye vision correction.

Keywords: cornea, ablation, Nd: YAG laser, absorption, threshold.

С. А. БАТИЩЕ¹, С. Б. БУШУК¹, А. А. КУЗЬМУК¹, А. В. САВИЧ¹, Г. А. ТАТУР¹, Г. ГРАБНЕР², В. КОТЭК³

ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ РОГОВИЦЫ ГЛАЗА НА ДЛИНЕ ВОЛНЫ 213 НМ ИЗ АБЛЯЦИОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

¹*Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: batis@dragon.bas-net.by*

²*Глазная клиника медицинского университета им. Парацельса, Зальцбург, Австрия,
e-mail: G.Grabner@salk.at*

³*Венский университет, кафедра физической химии, Вена, Австрия,
e-mail: wolfgang.kautek@univie.ac.at*

Экспериментально показано, что роговица глаза для УФ-излучения (213 нм) представляет собой неоднородный материал как по глубине, так и вдоль поверхности, в отношении эффективного коэффициента поглощения и локальной скорости абляционного удаления материала роговицы, что необходимо учитывать для более точного планирования профиля удаляемого коллагена роговицы при операциях коррекции зрения.

Ключевые слова: роговица, абляция, Nd:YAG-лазер, поглощение, порог.

Introduction. Far UV excimer lasers at 193 nm have found wide use in refractive and corneal surgery e.g. in photorefractive keratectomy (PRK), Laser Epithelial Keratomileusis (LASEK) and Laser in Situ Keratomileusis (LASIK).

Due to the complexity and the cost of these-type lasers, attention has also been paid to solid state lasers in the far UV range [1, 2]. Currently, the 5th harmonic (213 nm) of an Nd: YAG laser is also employed for these purposes.

During UV laser ablation cornea treatment a large amount of spatially profiled stroma is removed in accordance with a program taking into account cornea features.

A cornea effective absorption coefficient K_{eff} at ablation wavelengths, also including light scattering, incubation and non-linear effects, is a feature that significantly affects the results of laser ablation surgery. Measurement results for the effective absorption coefficient K_{eff} in the UV range, corresponding to the most popular ablation wavelengths of 193 nm and 213 nm, are very contradicting and are in the range 2300–40000 cm⁻¹ [3, 4]. Finally, the reason for such a big discrepancy is not clear, but it is most due to the

fact that the optical methods for measuring the cornea absorption coefficient K_{eff} in the UV range use thin slices of cornea or homogenized cornea mass taken from different cornea places and give the K value averaged over a large cornea cross section and depth. Also, they do not include the incubation and non-linear effects that take place at cornea ablation. As a result, the traditional methods do not allow evaluating the distribution of the effective absorption coefficient K_{eff} at the cornea depth for real optimal experimental conditions.

The present study is focused on estimating a 213 nm cornea effective absorption coefficient K_{eff} and its 3D distribution using the ablation measurements. The dependence of a local laser depth ablation rate $h = H/N$ on the cornea depth is also analyzed.

Experimental. The UV 213 nm cornea ablation investigations were carried out on a number of freshly enucleated calf eye cuts at a constant cornea depth of 260 μm to provide a cornea flat surface with diameters of 6–8 mm.

The optical scheme of the laser ablation research setup is shown in Fig. 1. The laser setup is described in detail in [5].

Ablation pits (Fig. 1) were regularly made on the periphery of the round flat surface of a cornea slice in effort to guarantee identical cornea ablation properties. Pits were also made on the inner radius. Pits were treated in the air at room temperature by focused N pulses on one spot with UV radiation (fifth harmonic of Nd: YAG laser, 213 nm) with a pulse duration of 10–15 ns and a repetition rate of 1 Hz. For reproducibility, the enucleated eye was kept pressed at 26 mmHg in a special holder that allowed the cornea flat surface to be practically normal to the 213 nm laser beam (the angle is not more than 5°).

A confocal Zeiss LSM 510 laser scanning microscope was used to determine a maximum pit depth H . The measuring accuracy of the pit depth was about $\pm 3 \mu\text{m}$.

For each pit, the 213 nm laser pulse fluence $F_{213, \max}$ in the pit center was determined from the experimentally measured energy E_{213} and the real laser beam distribution which was close to the Gaussian distribution. In the experiment, the Gaussian radius $w_0 = 347 \mu\text{m}$ for the 213 nm laser beam. (For $w_0 F(w_0) = 1/e^2$).

A number of eyes were investigated under various conditions.

Results and discussion. For one of the eyes, Fig. 2 shows the dependence of the pit depth H on a number of N pulses at $F_{213, \max} = 0.79 \text{ J/cm}^2$ (curve 1). A number of pits were done on the periphery of an eye slice and 4 pits – on the inner radius of the circle (Fig. 1). These 4 pits give the points with * in the rectangle corresponding to the dependence of H on N .

Fig. 2 also illustrates the dependences of the average laser depth ablation rate $h_{av} = H/N$ (curve 2) and the local laser depth ablation rate h_{loc} (curve 3) on the pit depth H . To get a local laser depth ablation rate h_{loci} at some depth H_i , the next layer by layer procedure was used. For the first upper surface layer, $h_{loc1}(H_1) = H_1/N_1$, where H_1 is the depth of the first most shallow pit made by N_1 pulses. For the next layer, $h_{loc2}(H_2) = (H_2 - H_1)/(N_2 - N_1)$. For the i -th pit with the depth H_i made by N_i pulses, $h_{loc-i}(H_i) = (H_i - H_{i-1})/(N_i - N_{i-1})$. We consider that all laser pulses have the same energy and the features of cornea material are axis-symmetric.

In Fig. 2, h_{loc} for the pits on the inner radius of the circle at $N = 40$ is shown as the points with * in the ellipse corresponding to the dependence of h on H .

It is seen from curve 2 (Fig. 2) that h_{av} lies within the range 1–2.5 μm , which is in a good agreement with [6, 7]. It has a maximum in the depth range 160–260 μm , which reaches 2.5 μm . Curve 3 for the local laser depth ablation rate h_{loc} demonstrates a much more distinct maximum which reaches 8 μm over the depth range 250–290 μm . The points in the ellipse are placed at a depth H of about 320 μm , which corresponds to the depth for the uncut eye. It is seen that h_{loc} for the pits on the inner radius of the circle good fit curve 3 at a depth of about 320 μm .

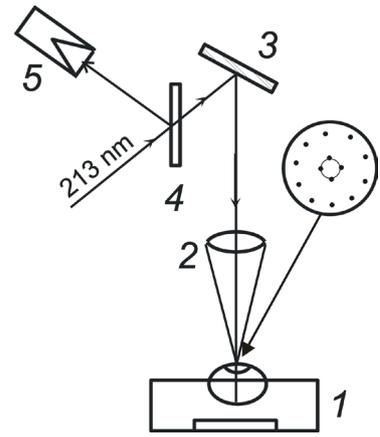


Fig. 1. Optical scheme of the laser ablation research setup: 1 – eye in the holder; 2 – focusing lens; 3 – deflecting mirror; 4 – reflecting quartz plate; 5 – energy meter

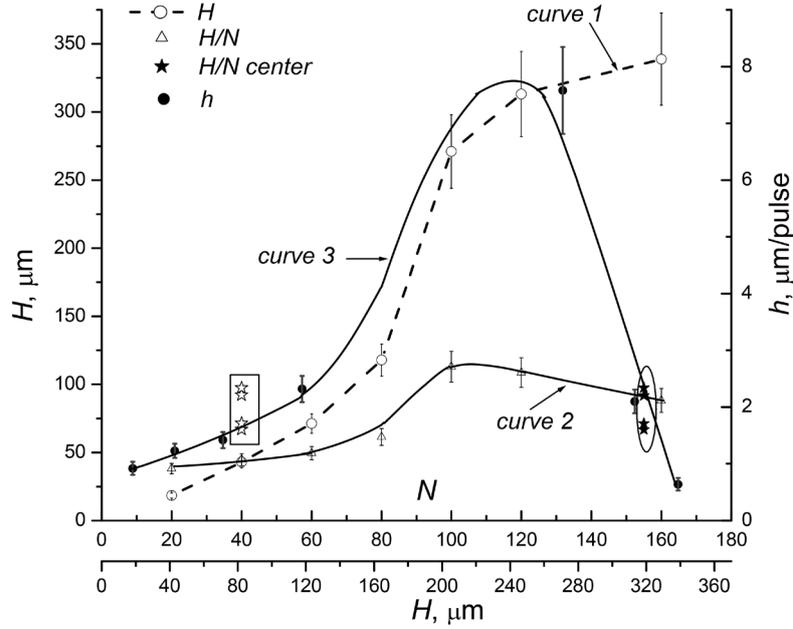


Fig. 2. Dependence of the pit depth H on a number of N pulses (curve 1), dependences of the average laser depth ablation rate $h_{av} = H/N$ (curve 2) and the local laser depth ablation rate h_{loc} (curve 3) on the pit depth H at $F_{213,max} = 0.79 \text{ J/cm}^2$

For each laser pit made at some depth in a homogeneous material, the effective absorption coefficient K_{eff} which includes light scattering, incubation and non-linear effects, can be calculated in accordance with [8]:

$$K_{eff} = (1/h) \cdot \ln(F_{213,max} / F_{thr}). \quad (1)$$

Here $h = H/N$ is the ablation depth per one laser pulse.

For the pits shown in Fig. 2, to find the depth distribution, local $K_{eff}^{loc}(H_i)$ was calculated according to (2).

$$K_{eff}^{loc}(H_i) = [\ln(F_{213,max}^i / F_{thr}^i)] / h_{loc_i}(H_i) = [\ln(F_{213,max}^i / F_{thr}^i)] / ((H_i - H_{i-1}) / (N_i - N_{i-1})). \quad (2)$$

Here i is the ordinal number of a pit on the periphery of the round flat surface of the cornea; $F_{213,max}^i$ is the laser beam fluence in the i -th pit center; F_{thr}^i is the threshold laser pulse fluence for the i -th pit; H_i is the depth of the pit i , $H_0 = 0$; N_i is the number of laser pulses used to create the i -th pit, $N_0 = 0$. For all i $F_{213,max} = 0.79 \text{ J/cm}^2$ and $F_{thr}^i = 0.04 \text{ J/cm}^2$.

$K_{eff}^{loc}(H)$ was calculated layer by layer beginning from a minimum experimental depth. $K_{eff}(H_i)$ was considered to be constant in each i -th layer for all pits done on the periphery of an eye slice.

As a result, calculation gives a real profile of the effective absorption coefficient $K_{eff}(H)$ with depth.

Fig. 3 demonstrates the dependence of the effective absorption coefficient $K_{eff}^{loc}(H)$ on the pit depth given in Fig. 2. Fig. 3 also shows $K_{eff}^{loc}(H)$ for the pits on the inner radius of the circle (in the ellipse).

A total accuracy of h and $K_{eff}^{loc}(H)$ is evaluated to be about $\pm 6-10 \%$.

From Fig. 3 it is distinctly seen that $K_{eff}^{loc}(H)$ first smoothly decreases from approximately 32000 cm^{-1} at the cornea surface to approximately $7000-9000 \text{ cm}^{-1}$ at a depth of $100-240 \mu\text{m}$ and then increases to approximately 50000 cm^{-1} at a depth of $300-340 \mu\text{m}$. At the same time, $K_{eff}^{loc}(H)$ for the pits in the centre of the flap lies in the middle range $12000-18000 \text{ cm}^{-1}$.

The data show that $K_{eff}^{loc}(H)$ for the cornea is not uniform in volume.

It is most likely due to the next. As our cornea experiments show, the cornea represents a structure that consists of 20 % collagen with a very high absorption coefficient and of 80 % water with a low absorption coefficient of about $0.12-0.15 \text{ cm}^{-1}$, which may be neglected. Collagen is distributed hetero-

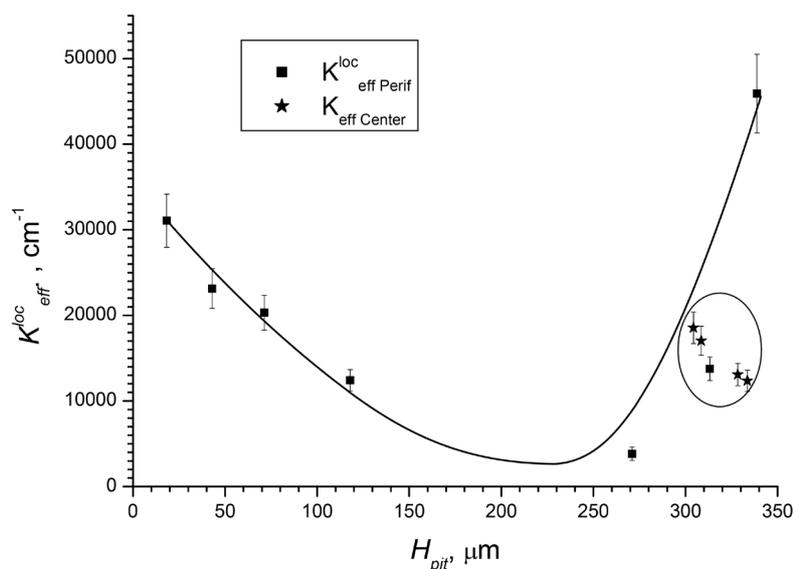


Fig. 3. Effective absorption coefficient $K_{eff}^{loc}(H)$ as a function of pit depth H on the periphery and for the pits on the inner radius of the circle (in the ellipse)

generously in the cornea. Superficial cornea layers are more dense and strong due to a higher content of collagen, and in the cornea inner layers the content of collagen is less, which is reflected in the $K_{eff}^{loc}(H)$ dependence.

Conclusions. It is shown experimentally that a cornea represents an UV inhomogeneous material both at depth and around a surface due to the UV effective absorption coefficient and the local laser depth ablation rate. The fact should be taken into account for a more exact planning of a profile of the cornea removed collagen material during of eye vision correction.

References

1. UV Solid State Laser (213 nm) Photo-Refractive Keratectomy / Q. Ren [et al.] / Ophthalmology. – 1994. – Vol. 101. – P. 883–889.
2. Solid state lasers for ocular surgery: preclinical study / R. Cubeddu [et al.] / Proc. SPIE. – 1994. – Vol. 2079. – P. 177–182.
3. Fisher, B. T. / Measurement of small-signal absorption coefficient and absorption cross section of collagen for 193-nm excimer laser light and the role of collagen in tissue ablation / B. T. Fisher, D. W. Hahn / Appl. Opt. – 2004. – Vol. 43. – P. 5443–5451.
4. Pettit, G. H. Corneal-tissue absorption coefficients for 193- and 213-nm ultraviolet radiation / G. H. Pettit, M. N. Ediger / Appl. Opt. – 1996. – Vol. 35. – P. 3386–3391.
5. Mechanistic comparison of pulse laser induced phase separation of particulates from cellulose paper at 213 nm and 532 nm / S. Arif [et al.] / Appl. Phys. A. – 2013. – Vol. 110. – P. 501–509.
6. Dmitriev, A. K. Mechanism of laser ablation of biotissues / A. K. Dmitriev, N. P. Furzikov // Izv. AN SSSR. – 1989. – No. 53. – P. 1105–1110.
7. Lantukh, V. V. Use of UV radiation of eximer lasers in eye microsurgery / V. V. Lantukh // Opt. Spectrosc. – 1987. – Vol. 63, iss. 5. – P. 1132–1138.
6. Krüger, J. Ultrashort Pulse Laser Interaction with Dielectrics and Polymers / J. Krüger, W. Kautek // Adv. Polym. Sci. – 2004. – Vol. 168. – P. 247–289.

Received 16.12.2015

УДК 535.42

П. А. АПАНАСЕВИЧ, В. И. ДАШКЕВИЧ, Г. И. ТИМОФЕЕВА

СРАВНЕНИЕ ЛУЧЕВЫХ НАГРУЗОК НА ТОРЦЫ НЕЛИНЕЙНЫХ КРИСТАЛЛОВ В ПГС С КОЛЬЦЕВЫМ РЕЗОНАТОРОМ

*Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: p.apanasevich@ifanbel.bas-net.by, v.dashkevich@dragon.bas-net.by,
g.timofeeva@dragon.bas-net.by*

Показано, что при параметрической генерации света (ПГС) мощных импульсов с использованием кольцевого резонатора и нелинейной среды в каждой из его секций лучевая нагрузка на торец нелинейной среды, примыкающий к выходному зеркалу, является наибольшей в случае, когда выходное зеркало расположено первым после входного зеркала, и наименьшей, когда выходное зеркало совпадает с входным зеркалом.

Ключевые слова: лазерное излучение, преобразование частоты, оптический резонатор, лучевая нагрузка.

P. A. APANASEVIC, V. I. DASHKEVICH, G. I. TIMOFEEVA

COMPARISON OF BEAM LOADS ON END FACE OF NONLINEAR CRYSTALS IN RING CAVITY OPO

*B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: p.apanasevich@ifanbel.bas-net.by, v.dashkevich@dragon.bas-net.by,
g.timofeeva@dragon.bas-net.by*

It is shown that at optical parametric generation of high power pulses using a ring cavity and a nonlinear medium in each of its sections, beam load on the end face of the nonlinear medium adjacent to the output mirror is greatest when the output mirror is positioned first after the input mirror and smallest when the output mirror coincides with input one.

Keywords: laser radiation, frequency conversion, optical cavity, beam load.

Введение. Параметрическая генерация света (ПГС) в настоящее время широко используется для изменения частоты лазерного излучения. А так как эффективность процесса перекачки фотонов из накачки в сигнальную волну, как известно [1–6], пропорциональна произведению амплитуд всех трех взаимодействующих световых пучков (включая холостую волну), то для ее повышения оптически нелинейную среду, как правило, помещают в кольцевой резонатор, образуемый тремя зеркалами. При этом представляется предпочтительным нелинейную среду брать в виде трех кристаллов – по одному кристаллу в каждом плече резонатора, что уменьшает размеры лазерной системы и минимизирует время обхода излучением резонатора [7, 8]. Что же касается зеркал, то одно из них должно хорошо пропускать накачку в резонатор (входное зеркало), и одно – эффективно выводить из резонатора сигнальную волну (выходное зеркало). В остальном они должны быть высоко отражающими на частотах взаимодействующих волн. Функции входного и выходного зеркал могут выполнять как разные зеркала, так и одно из них.

Ясно, что при высоких интенсивностях накачки суммарная лучевая нагрузка на отдельные элементы резонатора может быть очень высокой и приводить к их повреждению. В настоящей статье проведено сравнение лучевых нагрузок на прилегающие к выходному зеркалу торцы нелинейных кристаллов при разных положениях выходного зеркала относительно входного.

Исходные соотношения. В основу данной работы положим уравнения переноса интенсивностей [9]:

$$\frac{1}{u_j} \frac{\partial I^j}{\partial t} + \frac{\partial I^j}{\partial z} = Q^j - \alpha_j I^j. \quad (1)$$

Здесь $I^j = \omega_p \bar{I}^j / \omega_j$, \bar{I}^j – интенсивности накачки ($j = p$), сигнальной ($j = s$) и холостой ($j = i$) волн; $Q^{s,i} = Q$ и $Q^p = -Q$; $Q = b'(I^p I^s I^i)^{1/2}$; b' – параметр, пропорциональный коэффициенту параметрического взаимодействия; α_j – коэффициент линейных потерь.

В случае импульсной накачки из (1) после интегрирования по времени и поперечному сечению пучков получаются уравнения

$$\frac{dW^j}{dz} = P^j - \alpha_j W^j. \quad (2)$$

Здесь $(\omega_j / \omega_p) W^j = (\omega_j / \omega_p) \int I^j dt dS$ – энергии взаимодействующих импульсов в точке z , $P^j = \int Q^j dt dS$ – параметр, определяющий изменения этой энергии на единице пути. В дальнейшем параметр W_j также будем называть энергией.

Изменения энергий взаимодействующих импульсов в кристалле длиной l согласно (2) выражаются соотношениями

$$W_l^j = a_j W_0^j + M^j, \quad (3)$$

где $a_j = \exp(-\alpha_j l)$ и $M^j = a_j \int_0^l P^j e^{\alpha_j z} dz$ – приращение энергии импульсов сигнальной M^s и холостой M^i волн и уменьшение энергии импульса накачки M^p (по определению M^p – отрицательно) на пути l . Из определения этого параметра следует, что названные изменения происходят тем интенсивнее, чем больше произведение интенсивностей всех трех взаимодействующих импульсов, и тем меньше, чем больше коэффициент потерь α_j . Если, например, коэффициенты потерь α_j накачки и сигнальной волны малы ($\alpha_{p,s} l \ll 1$) или близки по величине ($(\alpha_s - \alpha_p) l \ll 1$), то можно положить $M^p \approx -M^s$.

В случае ПГС в кольцевом резонаторе энергии на торцах разных элементов рабочей среды наряду с соотношениями (3) связаны между собой и граничными условиями на зеркалах. Если резонатор трехзеркальный и рабочая среда представлена тремя кристаллами, расположенными в разных плечах резонатора (см. рисунок), то эти условия имеют вид

$$W_{10}^{s,i} = R_1^{s,i} W_{3l}^{s,i}, \quad W_{20}^{s,i} = R_2^{s,i} W_{1l}^{s,i}, \quad W_{30}^{s,i} = R_3^{s,i} W_{2l}^{s,i}, \quad (4)$$

$$W_{10}^p = W_L + R_1^p W_{3l}^p, \quad W_{20}^p = R_2^p W_{1l}^p, \quad W_{30}^p = R_3^p W_{2l}^p. \quad (5)$$

Здесь W_L – энергия импульса накачки, вошедшего в резонатор через зеркало 1 (входное), и R_n^j – коэффициент отражения излучения j зеркалом n (точнее, коэффициент передачи энергии излучения от одного элемента рабочей среды к другому с учетом отражения на зеркале и возможных потерь на пути между элементами).

Соотношения для энергий импульсов. Пользуясь равенствами (3–5), нетрудно показать, что энергии сигнальной и холостой волн на выходах из разных элементов ПГС-среды, если эти элементы одинаковы по длине и другим параметрам, определяются соотношениями

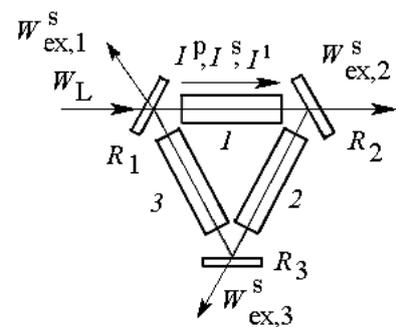


Схема рассматриваемой ПГС-системы

$$W_{1l}^{s,i} = \frac{M_1^{s,i} + \bar{R}_1^{s,i} M_3^{s,i} + \bar{R}_1^{s,i} \bar{R}_3^{s,i} M_2^{s,i}}{1 - \bar{R}_1^{s,i} \bar{R}_2^{s,i} \bar{R}_3^{s,i}}, \quad (6)$$

$$W_{2l}^{s,i} = \frac{M_2^{s,i} + \bar{R}_2^{s,i} M_1^{s,i} + \bar{R}_1^{s,i} \bar{R}_2^{s,i} M_3^{s,i}}{1 - \bar{R}_1^{s,i} \bar{R}_2^{s,i} \bar{R}_3^{s,i}}, \quad (7)$$

$$W_{3l}^{s,i} = \frac{M_3^{s,i} + \bar{R}_3^{s,i} M_2^{s,i} + \bar{R}_3^{s,i} \bar{R}_2^{s,i} M_1^{s,i}}{1 - \bar{R}_1^{s,i} \bar{R}_2^{s,i} \bar{R}_3^{s,i}}, \quad (8)$$

а энергии накачки соотношениями

$$W_{1l}^p = \frac{\alpha_p W_L + M_1^p + \bar{R}_1^p M_3^p + \bar{R}_1^p \bar{R}_3^p M_2^p}{1 - \bar{R}_1^p \bar{R}_2^p \bar{R}_3^p}, \quad (9)$$

$$W_{2l}^p = \frac{M_2^p + \bar{R}_2^p (\alpha_p W_L + M_1^p) + \bar{R}_1^p \bar{R}_2^p M_3^p}{1 - \bar{R}_1^p \bar{R}_2^p \bar{R}_3^p}, \quad (10)$$

$$W_{3l}^p = \frac{M_3^p + \bar{R}_3^p M_2^p + \bar{R}_3^p \bar{R}_2^p (\alpha_p W_L + M_1^p)}{1 - \bar{R}_1^p \bar{R}_2^p \bar{R}_3^p}, \quad (11)$$

где $\bar{R}_n^j = R_n^j a_j$ и M_n^p – отрицательные величины. Подставив (6)–(11) в (4) и (5), легко найти и энергии взаимодействующих импульсов на входах соответствующих элементов рабочей среды. Энергия генерируемого, т. е. выходящего из резонатора, импульса сигнальной волны определяется равенством

$$W_{ex,n}^s = (1 - R_n^s)(\omega_s / \omega_p) W_{n-1,l}^s, \quad (12)$$

где n – индекс выходного зеркала. При $n = 1$ вместо $n - 1$ в формуле (12) следует брать 3.

Хотя в рамках излагаемого здесь подхода нельзя определить конкретные значения величин M_n^j , тем не менее, пользуясь формулами (4)–(11), в ряде случаев можно сделать вполне определенные заключения об относительных значениях энергий взаимодействующих импульсов в различных элементах резонатора.

В качестве примера сравним характеристики ПГС-систем, различающихся положением выходного зеркала для сигнальной волны: ПГС-1, в котором входное зеркало для накачки является и выходным для сигнальной волны (т. е. $R_1^s \neq 1$); ПГС-2 и ПГС-3, в которых роль выходного зеркала играют зеркала 2 и 3 (т. е. $R_2^s \approx 1$ или $R_3^s \approx 1$). При этом для простоты будем считать, что коэффициенты отражения сигнальной волны другими зеркалами равны единице, что входное зеркало полностью пропускает накачку, (т. е. $R_1^p = 0$) и коэффициенты отражения накачки другими зеркалами равны единице и что коэффициенты отражения холостой волны различными зеркалами совпадают ($R_n^i = R_i$). Предположим также, что $\alpha_p = \alpha_s$, а следовательно, $M_n^p = -M_n^s$.

При этих предположениях в ПГС-1 энергии импульсов, падающих на выходное зеркало, как следует из (8) и (11), определяются выражениями

$$W_{3l}^s = \frac{M_3^s + a_s M_2^s + a_s^2 M_1^s}{1 - a_s^3 R_1^s}, \quad (13)$$

$$W_{3l}^p = a_s^3 W_L - a_s^2 M_1^s - a_s M_2^s - M_3^s, \quad (14)$$

$$W_{3l}^i = \frac{M_i (1 + \bar{R}_i + \bar{R}_i^2)}{1 - \bar{R}_i^3}. \quad (15)$$

При записи выражения (15) учтено, что $M_n^i = M_i$, так как $R_n^i = R_i$ и кристаллы одинаковы. Выражения для энергий, падающих на выходные зеркала в ПГС-2 и ПГС-3, имеют вид

$$\tilde{W}_{1l}^s = \frac{\tilde{M}_1^s + a_s \tilde{M}_3^s + a_s^2 \tilde{M}_2^s}{1 - a_s^3 R_2^s}, \quad (16)$$

$$\tilde{W}_{1l}^p = a_p W_L - \tilde{M}_1^s, \quad (17)$$

$$\tilde{W}_{1l}^i = \frac{\tilde{M}_i (1 + \bar{R}_i + \bar{R}_i^2)}{1 - \bar{R}_i^3}, \quad (18)$$

$$\ddot{W}_{2l}^s = \frac{\ddot{M}_2^s + a_s \ddot{M}_1^s + a_s^2 \ddot{M}_3^s}{1 - a_s^3 R_3^s}, \quad (19)$$

$$\ddot{W}_{2l}^p = a_p^2 W_L - \ddot{M}_2^s - a_p \ddot{M}_1^s, \quad (20)$$

$$\ddot{W}_{2l}^i = \frac{\ddot{M}_i (1 + \bar{R}_i + \bar{R}_i^2)}{1 - \bar{R}_i^3}. \quad (21)$$

Параметры M , \tilde{M} и \ddot{M} , вообще говоря, могут значительно различаться. Это особенно хорошо видно из сравнения полей на входе в кристаллы. Например, при $R_1^p = 0$ энергия, а следовательно, и интенсивность импульса накачки на входе в кристалл l во всех случаях равна W_L . Энергии же сигнальной волны в этой точке в случае ПГС-1 и ПГС-2 соответственно равны $W_{10}^s = R_1^s W_{3l}^s$ и $\tilde{W}_{10}^s = \tilde{W}_{3l}^s$, где \tilde{W}_{3l}^s определено равенством (13) и

$$\tilde{W}_{3l}^s = (\tilde{M}_3^s + a_s \tilde{M}_2^s + a_s^2 R_2^s \tilde{M}_1^s) / (1 - a_s^3 R_2^s). \quad (22)$$

Из приведенных соотношений следует, что при высоких эффективностях генерации (как правило, невысоких значениях коэффициента отражения выходного зеркала R_n^s) энергия, а следовательно, и интенсивность импульса сигнальной волны на входе в кристалл l в системе ПГС-2 существенно превышает интенсивность в этой точке в ПГС-1. А это значит, что \tilde{M}_1^s должно быть значительно больше M_1^s . Подобным образом можно уяснить и соотношения других параметров M . Приблизительно также соотносятся и интенсивности холостой волны.

Лучевые нагрузки на торцы элементов нелинейной среды. Пользуясь соотношениями (12)–(21), нетрудно сопоставить суммарные лучевые нагрузки на торцы кристаллов, которые прилегают к выходному зеркалу, в ПГС-системах, отличающихся положением выходного зеркала. Эти нагрузки определяются соотношениями

$$W_1 = a_s^3 W_L - \frac{\omega_p}{\omega_s} (1 - a_s^3 R_1^s) \frac{W_{ex,1}^s}{1 - R_1^s} + \frac{W_{ex,1}^s}{1 - R_1^s} + \frac{\omega_i}{\omega_p} W_{3l}^i \quad \text{в ПГС-1}, \quad (23)$$

$$W_2 = a_s W_L - \tilde{M}_1^s + \frac{W_{ex,2}^s}{1 - R_2^s} + \frac{\omega_i}{\omega_p} \tilde{W}_{1l}^i \quad \text{в ПГС-2}, \quad (24)$$

$$W_3 = a_s^2 W_L - \ddot{M}_2^s - a_s \ddot{M}_1^s + \frac{W_{ex,3}^s}{1 - R_3^s} + \frac{\omega_i}{\omega_p} \ddot{W}_{1l}^i \quad \text{в ПГС-3}. \quad (25)$$

Энергии сигнальной волны здесь выражены через энергии, выходящие из резонатора, т. е. практически измеряемые величины.

Отрицательные слагаемые в приведенных формулах учитывают истощение накачки вследствие процесса ПГС: в ПГС-2 это слагаемое имеет наименьшее значение, а в ПГС-1 – наибольшее. В ПГС-3 истощение накачки – промежуточное по сравнению с ПГС-1 и ПГС-2.

При высоких эффективностях истощение накачки может быть сравнимо со слагаемым $a_s^3 W_L$, определяющим максимум энергии накачки, которая может быть преобразована в сигнальную волну. Последние слагаемые в формулах (23)–(25) учитывают вклад в лучевую нагрузку холостой волны. При одинаковых зеркалах, что было предположено, и сравнимых энергиях генерации они сравнимы по величине.

С учетом сказанного из сравнения (23) и (24) можно заключить, что при высоких сравнимых эффективностях $W_{ex,n}^s / W_L$ генерации лучевая нагрузка на торец нелинейной среды, подходящий к выходному зеркалу, в ПГС-2 значительно выше, чем в ПГС-1. С ростом мощности накачки это должно приводить к более раннему его лучевому повреждению по сравнению с другими элементами нелинейной среды. Поэтому для ПГС-преобразования мощных импульсов, казалось бы, следует считать предпочтительным ПГС-1. Однако при этом следует учитывать лучевую стойкость зеркала R_1 , так как на него, наряду с лучевой нагрузкой, определяемой формулой (23), приходится и нагрузка от падающей на резонатор накачки.

Заключение. Приведены соотношения, определяющие энергии накачки, сигнальной и холостой волн на торцах рабочей нелинейной среды при ПГС в кольцевом резонаторе, с нелинейной средой во всех плечах резонатора и при различных положениях выходного зеркала относительно входного. Показано, что наибольшая лучевая нагрузка на торец нелинейной среды, примыкающий к выходному зеркалу, имеет место в случае, когда выходным зеркалом является первое после входного зеркала, и минимальная, когда выходное зеркало совпадает с входным. Однако при совмещении выходного зеркала с входным следует учитывать, что на это зеркало, наряду с внутрирезонаторной лучевой нагрузкой, приходится и нагрузка от падающей на резонатор накачки. В ПГС-преобразователе, в котором выходным зеркалом является второе после входного, лучевая нагрузка на торец нелинейной среды, примыкающий к выходному зеркалу, имеет промежуточное значение по сравнению с другими.

Список использованной литературы

1. *Rosencher, E.* Oscillation characteristics of continuous-wave optical parametric oscillators: beyond the mean-field approximation / E. Rosencher, C. Fabre // *JOSA B.* – 2002. – Vol. 19 – P. 1107–1116.
2. *Godard, A.* Energy Yield of Pulsed Optical Parametric Oscillators: A Rate-Equation Analysis / A. Godard, E. Rosencher // *IEEE J. of QE.* – 2004. – Vol. 40, N 6. – P. 784–790.
3. *Saygin, M. Yu.* Theory of the optical parametric oscillator in the quadratic and cubic approximations / M. Yu. Saygin, A. S. Chirkin // *Laser Phys.* – 2016. – Vol. 26. – 015402 (10 p).
4. *Ахманов, А. С.* Проблемы нелинейной оптики / А. С. Ахманов, Р. В. Хохлов. – М.: ВИНТИ, 1964.
5. *Бломберген, Н.* Нелинейная оптика: пер. с англ. / Н. Бломберген; под ред. С. А. Ахманова, Р. В. Хохлова. – М.: Мир, 1966.
6. *Шен, И. Р.* Принципы нелинейной оптики / И. Р. Шен; пер. с англ. И. Л. Шумая; под ред. С. А. Ахманова. – М.: Наука, 1989.
7. Высокоэффективный параметрический преобразователь на кристалле КТР / В. Л. Наумов [и др.] // *Квантовая электроника.* – 2000. – Т. 30, № 7. – С. 632–634.
8. О повышении надежности безопасного для глаз кольцевого ПГС на кристаллах КТР / В. И. Дашкевич [и др.] // *Лазерная физика и оптические технологии: сб. науч. тр. VIII Междунар. науч. конф., 27–30 сент. 2010 г., Минск: [в 2 т.] / Нац. акад. наук Беларуси [и др.]; под ред В. А. Орловича [и др.]. – Минск, 2010. – Т. 2. – С. 42–45.*
9. *Апанасевич П. А.* Зависимость порога и эффективности ПГС от параметров резонатора и накачки / А. П. Апанасевич, В. И. Дашкевич, Г. И. Тимофеева // *ЖПС.* – 2016. – Т. 83, № 5.

Поступила в редакцию 26.05.2016

ІНФАРМАТЫКА

УДК 519.6

П. И. СОБОЛЕВСКИЙ, С. В. БАХАНОВИЧ

ДВУХУРОВНЕВЫЙ ТАЙЛИНГ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ ПРОСТРАНСТВЕННО-ВРЕМЕННОМ ОТОБРАЖЕНИИ АЛГОРИТМОВ НА ПАРАЛЛЕЛЬНЫЕ АРХИТЕКТУРЫ

*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: sobolevsky@im.bas-net.by, bsv@im.bas-net.by*

Предложена идея использования двухуровневого тайлинга для решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов на параллельные вычислительные системы заданной размерности и размера. Разработан формализованный метод параметризованного двухуровневого тайлинга. Получены формулы для определения векторов глобальных зависимостей между тайлами первого и второго уровней, а также формальное представление множеств итераций, порождающих эти зависимости, в виде многогранников с явным выражением их границ. На основе разработанного метода двухуровневого тайлинга и локально параллельной глобально последовательной стратегии отображения предложен формализованный метод решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов в интеграции с тайлингом.

Ключевые слова: тайлинг, пространственно-временное отображение, локально параллельная глобально последовательная стратегия, параллельная архитектура, суперкомпьютер.

P. I. SOBOLEVSKY, S. V. BAKHANOVICH

TWO-LEVEL TILING AND ITS APPLICATION IN THE SPACE-TIME MAPPING OF ALGORITHMS ONTO PARALLEL ARCHITECTURES

*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: sobolevsky@im.bas-net.by, bsv@im.bas-net.by*

The idea of application of two-level tiling at space-time mapping of algorithms onto parallel computing systems is proposed. A formalized method of parameterized two-level tiling is developed. The formulas for determination of global dependences between different-level tiles are constructed. The formal representation of sets of iterations generating these dependences is obtained. The representation is given in the form of polyhedra with an explicit expression of their boundaries. A formalized method of space-time mapping onto supercomputers is developed. The method is based on the locally parallel globally sequential mapping strategy and the designed method of two-level tiling. The method realizes the proposed idea of space-time mapping in integration with tiling.

Keywords: tiling, space-time mapping, locally sequential globally parallel strategy, parallel architecture, supercomputer.

Введение. Эффективность параллельных программ зависит от ряда факторов. Очевидно, что прежде всего она зависит от выбора алгоритма решения задачи и его распараллеливания. Но не меньшее значение имеет и то, насколько при разработке и программной реализации параллельного алгоритма учитываются особенности архитектуры суперкомпьютера.

На практике при разработке программных продуктов широко используется тайлинг, который является одним из наиболее результативных средств оптимизации программ. Тайлинг позволяет значительно рациональнее использовать многоуровневую память компьютера и, кроме этого, помогает оптимизировать операции обмена данными в параллельных приложениях для вычислительных систем с распределенной памятью.

Высокая эффективность тайлинга привела к его интенсивному исследованию и появлению большого числа работ, посвященных его различным теоретическим и прикладным аспектам [1–6]. В настоящее время существует ряд методов тайлинга, дающих возможность оптимизировать как последовательные, так и параллельные программы. Тем не менее тема тайлинга продолжает активно развиваться, и одним из перспективных направлений является идея многоуровневого тайлинга [7]. Многоуровневый тайлинг в сравнении с одноуровневым тайлингом в большей степени может увеличить эффективность использования многоуровневой памяти компьютера. Кроме того, тайлинг такого типа может быть использован для решения и других задач.

В данной работе предлагается идея использования двухуровневого тайлинга для решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов на параллельные вычислительные системы заданной размерности и фиксированного размера. Суть идеи заключается в интеграции локально параллельной глобально последовательной стратегии отображения алгоритмов [8] и техники двухуровневого тайлинга с целью комплексного решения задач пространственно-временного отображения и тайлинга.

Изначально суть тайлинга состоит в увеличении зернистости алгоритма, множество операций которого разбивается на группы-тайлы, каждый тайл рассматривается как зерно вычислений или макрооперация. Поскольку тайл является атомарным, то при распределении операций алгоритма между процессорами суперкомпьютера операции, принадлежащие одному и тому же тайлу, отображаются на один и тот же процессор. Зависимости между операциями алгоритма порождают глобальные зависимости между тайлами, которые, в свою очередь, определяют зависимости между процессорами при отображении тайлов на параллельные архитектуры.

Для реализации идеи отображения алгоритмов в интеграции с двухуровневым тайлингом в работе предложен необходимый математический аппарат: дано формальное определение тайлов первого и второго уровней, исследована задача построения векторов глобальных зависимостей между тайлами фиксированного уровня, получены формулы, определяющие зависимости между тайлами. Кроме этого построены формулы, которые позволяют определить зависимости между процессорами при отображении тайлов на параллельную архитектуру. Предложенный математический аппарат является развитием формализованной методики тайлинга, представленной в работе [6]. На основе разработанного метода двухуровневого тайлинга и локально параллельной глобально последовательной стратегии отображения (LPGS-стратегии) построен формализованный метод решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов в интеграции с тайлингом.

Тайлинг. Тайлинг (tiling) – это преобразование вычислительного алгоритма с целью укрупнения зернистости путем объединения определенного числа мелких операций алгоритма в крупные зерна вычислений – тайлы. При тайлинге укрупнение зернистости осуществляется покрытием области вычислений однотипными n -мерными параллелепипедами (тайлами) [1–6].

Будем предполагать, что область вычислений алгоритма (индексное множество) – это n -мерный выпуклый многогранник, описание которого в декартовой системе координат в арифметическом пространстве Z^n имеет вид

$$V = \{J \in Z^n \mid LJ \geq I\}, \quad (1)$$

где целочисленная матрица $L \in Z^{m \times n}$ и целочисленный вектор $I \in Z^m$ являются параметрами, определяющими область вычислений. Каждой точке области вычислений V соответствует ограниченный набор операций алгоритма. В данной работе все векторные равенства и неравенства понимаются в обычном смысле (выполняются для каждой координаты).

Кроме области вычислений алгоритмы характеризуются множеством векторов зависимостей Φ . Данное множество отражает информационные зависимости между операциями алгоритма. Наличие вектора $\varphi \in \Phi$ означает, что в области вычислений V существуют точки J и $J + \varphi$ такие, что операции, приписанные точке $J + \varphi$, информационно зависят от результатов операций, приписанных точке J .

Разбиение арифметического пространства Z^n и, следовательно, области вычислений алгоритма на тайлы осуществляется нелинейным отображением $Z^n \xrightarrow{f} Z^n$:

$$J^{gl} = f(J) = \left\lfloor R^{-1}H(J - J^{\bar{0}}) \right\rfloor, J \in Z^n. \quad (2)$$

Отображение f определяется тремя параметрами $H \in Z^{n \times n}$, $R \in Z^{n \times n}$, $J^{\bar{0}} \in Z^n$ и позволяет идентифицировать тайлы вектором $J^{gl} \in Z^n$. Параметры тайлинга R , H и $J^{\bar{0}}$ имеют геометрический смысл и определены следующим образом.

1. H – нижняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали; составлена построчно из координат нормальных векторов $h_1 = (1, 0, \dots, 0)$, $h_k = (h_{k1}, h_{k2}, \dots, h_{kk-1}, 1, 0, \dots, 0) \in Z^n$, $k = 2, 3, \dots, n$, гиперплоскостей, проходящих через точки пространства Z^n . Векторы h_k , $k = 1, 2, \dots, n$, определяют параллелепипедальную форму тайла.

2. $R = \text{diag}(r_1, r_2, \dots, r_n)$ – диагональная матрица, определяющая размеры тайла, где r_k – количество различных параллельных гиперплоскостей с нормальными векторами h_k , $k = 1, 2, \dots, n$, которые проходят через все целочисленные точки одного тайла. Обозначим дополнительно $\bar{R} = (r_1, r_2, \dots, r_n)$, $\bar{1} = (1, 1, \dots, 1)$.

3. Точку тайла J^{gl} , в которой достигается наименьшее значение функции HJ , будем называть начальной точкой тайла и обозначать $J^{\bar{0},gl}$. В формуле (2) целочисленный вектор $J^{\bar{0}} \in Z^n$ определяет начальную точку нулевого тайла $J^{gl} = \bar{0}$. Если точка $J^{\bar{0}}$ определена, то начальная точка $J^{\bar{0},gl}$ любого тайла $J^{gl} \in Z^n$ определяется условием $RJ^{gl} = H(J^{\bar{0},gl} - J^{\bar{0}})$ и равна $J^{\bar{0},gl} = J^{\bar{0}} + H^{-1}RJ^{gl}$.

Каждый тайл, идентифицированный вектором $J^{gl} \in Z^n$, состоит из $\prod_{m=1}^n r_m$ точек с целочисленными координатами. Обозначим множество этих точек $T(J^{gl})$,

$$T(J^{gl}) = \left\{ J \in Z^n \mid J^{gl} = \left\lfloor R^{-1}H(J - J^{\bar{0}}) \right\rfloor \right\} = \left\{ J \in Z^n \mid \bar{0} \leq H(J - J^{\bar{0},gl}) \leq \bar{R} - \bar{1} \right\}, \quad (3)$$

а множество точек из области V , принадлежащих тайлу $J^{gl} \in Z^n$, обозначим $V^{loc}(J^{gl})$,

$$V^{loc}(J^{gl}) = T(J^{gl}) \cap V = \left\{ J \in Z^n \mid \bar{0} \leq H(J - J^{\bar{0},gl}) \leq \bar{R} - \bar{1}, J \in V \right\}. \quad (4)$$

О п р е д е л е н и е 1 [6]. Тайл J^{gl} будем называть пустым, если $V^{loc}(J^{gl}) = \emptyset$, неполным, если $V^{loc}(J^{gl}) \neq T(J^{gl})$, и будем называть полным, если $V^{loc}(J^{gl}) = T(J^{gl})$.

Из приведенных определений следует, что множество тайлов, имеющих с областью V непустое пересечение (множество тайлов, покрывающих область вычислений), которое будем обозначать V^{gl} , можно представить в виде

$$V^{gl} = \left\{ J^{gl} \in Z^n \mid T(J^{gl}) \cap V \neq \emptyset \right\} = \left\{ J^{gl} \in Z^n \mid J^{gl} = \left\lfloor R^{-1}H(J - J^{\bar{0}}) \right\rfloor, J \in V \right\}. \quad (5)$$

Согласно концепции тайлинга, непустой тайл рассматривается как новое укрупненное зерно вычислений или макрооперация, которое обладает свойством атомарности. В результате применения тайлинга алгоритм преобразуется к блочному виду (блок – макрооперация) и выполняется как последовательность макроопераций по двухуровневой схеме: внешний уровень – это уровень макроопераций, внутренний – уровень операций в пределах тайла. При параллельной реализации алгоритма операции тайла, в силу его атомарности, отображаются на один и тот же процессор, при этом все необходимые обмены данными выполняются либо до выполнения макрооперации (прием начальных данных), либо после нее (передача результатов).

Информационные зависимости между операциями алгоритма порождают глобальные зависимости между тайлами. Поскольку тайлы являются атомарными, глобальные зависимости между тайлами не должны быть взаимнообратными. Данное требование формализуется в виде условия на матрицу H [1]:

$$H\varphi \geq \bar{0}, \quad \varphi \in \Phi. \quad (6)$$

Условие (6) является условием корректности тайлинга, которое необходимо учитывать при выборе параметра H .

Двухуровневый тайлинг. Метод двухуровневого тайлинга, представленный в данной работе, предназначен для алгоритмов с однородными зависимостями. Решение задачи поиска глобальных зависимостей между тайлами и определения множеств информационно зависимых операций, ассоциированных с глобальными зависимостями, выполнено только для алгоритмов такого типа. Кроме этого, метод предполагает разбиение области вычислений алгоритма только на полные тайлы, что накладывает некоторые ограничения на форму и размеры области вычислений. В случае невырожденного тайлинга область вычислений должна представлять собой n -мерный параллелепипед.

Пусть область вычислений – n -мерный параллелепипед вида

$$V = \{J \in \mathbf{Z}^n \mid m \leq HJ \leq M\} = \{J \in \mathbf{Z}^n \mid m_k \leq h_k \cdot J \leq M_k, k = 1, 2, \dots, n\}, \quad (7)$$

где матрица H удовлетворяет условию корректности тайлинга (6). Матрицу H будем использовать в качестве параметра, определяющего форму тайла, а параметры тайлинга R и $J^{\bar{0}}$ выбирать исходя из условия целочисленности векторов $R^{-1}(m - HJ^{\bar{0}})$ и $R^{-1}(M - m + \bar{1})$, а также условия $\bar{R} \leq \bar{R}^{\max}$, $r_k^{\max} = M_k - m_k + 1$, $k = 1, 2, \dots, n$.

Для областей вида (7) в работе [6] получено явное представление множества тайлов

$$V^{gl} = \left\{ J^{gl} \in \mathbf{Z}^n \mid \left\lfloor R^{-1}(m - HJ^{\bar{0}}) \right\rfloor \leq J^{gl} \leq \left\lfloor R^{-1}(M - HJ^{\bar{0}}) \right\rfloor \right\},$$

которое с учетом целочисленности векторов $R^{-1}(m - HJ^{\bar{0}})$ и $R^{-1}(M - m + \bar{1})$ принимает вид

$$V^{gl} = \left\{ J^{gl} \in \mathbf{Z}^n \mid \bar{0} \leq J^{gl} - R^{-1}(m - HJ^{\bar{0}}) \leq R^{-1}\bar{R}^{\max} - \bar{1} \right\} \quad (8)$$

и состоит только из полных тайлов, т. е. $V^{loc}(J^{gl}) = T(J^{gl})$, $J^{gl} \in V^{gl}$.

Условие целочисленности векторов $R^{-1}(m - HJ^{\bar{0}})$ и $R^{-1}(M - m + \bar{1})$ может быть удовлетворено, например, если положить $J^{\bar{0}} = H^{-1}m$ и выбрать в качестве диагональных элементов матрицы R делители соответствующих координат вектора $\bar{R}^{\max} = M - m + \bar{1}$. В этом случае

$$V^{gl} = \left\{ J^{gl} \in \mathbf{Z}^n \mid \bar{0} \leq J^{gl} \leq R^{-1}\bar{R}^{\max} - \bar{1} \right\}. \quad (9)$$

Далее мы будем предполагать именно такой выбор параметров тайлинга.

Тайлы, полученные при разбиении области вычислений, будем называть тайлами первого уровня. Каждый тайл первого уровня представляет собой n -мерный параллелепипед, который может быть представлен по аналогии с определением области вычислений (7) в виде

$$T(J^{gl}) = \left\{ J \in \mathbf{Z}^n \mid \bar{0} \leq H(J - J^{\bar{0}, gl}) \leq \bar{R} - \bar{1} \right\} = \left\{ J \in \mathbf{Z}^n \mid \tilde{m} \leq HJ \leq \tilde{M} \right\}, \quad (10)$$

$$\tilde{m} = m + RJ^{gl}, \quad \tilde{M} = m + RJ^{gl} + \bar{R} - \bar{1}.$$

В соответствии с идеей многоуровневого тайлинга, каждый тайл первого уровня разбивается на множество тайлов следующего, второго, уровня. При определенном выборе параметров тайлинга второго уровня, которые будем обозначать \tilde{H} , \tilde{R} и $\tilde{J}^{\bar{0}}$, можно осуществить покрытие каждого тайла первого уровня J^{gl} полными тайлами второго уровня. Для этого достаточно определить параметры тайлинга второго уровня, положив $\tilde{H} = H$, $\tilde{J}^{\bar{0}} = H^{-1}\tilde{m} = H^{-1}(m + RJ^{gl}) = J^{\bar{0},gl}$, а в качестве диагональных элементов \tilde{r}_k , $k = 1, 2, \dots, n$, матрицы \tilde{R} , определяющей размеры тайла второго уровня, взять делители соответствующих координат \tilde{r}_k^{\max} вектора $\tilde{R}^{\max} = \tilde{M} - \tilde{m} + \tilde{I} = \tilde{R}$. При таком выборе параметров тайлинга получим множество тайлов второго уровня, состоящее только из полных тайлов.

Тайл второго уровня будем идентифицировать вектором \tilde{J}^{gl} в привязке к тайлу первого уровня J^{gl} , которому этот тайл принадлежит, или, что то же самое, $2n$ -мерным вектором $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in Z^{2n}$. Множество точек, принадлежащих тайлу второго уровня, имеет вид

$$\begin{aligned} T(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) &= \left\{ J \in Z^n \mid \bar{0} \leq H(J - \tilde{J}^{\bar{0},gl}) \leq \tilde{R} - \tilde{I} \right\} = \\ &= \left\{ J \in Z^n \mid \tilde{R}\tilde{J}^{gl} + RJ^{gl} + m \leq HJ \leq \tilde{R}\tilde{J}^{gl} + RJ^{gl} + m + \tilde{R} - \tilde{I} \right\}, \quad \tilde{J}^{\bar{0},gl} = H^{-1}(\tilde{R}\tilde{J}^{gl} + RJ^{gl} + m). \end{aligned} \quad (11)$$

С учетом сделанных предположений о параметрах тайлинга, множество тайлов второго уровня, принадлежащих тайлу $J^{gl} \in V^{gl}$, может быть представлено в виде

$$\tilde{V}^{gl}(J^{gl}) = \left\{ (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in Z^{2n} \mid \bar{0} \leq \tilde{J}^{gl} \leq \tilde{R}^{-1}\tilde{R} - \tilde{I} \right\}. \quad (12)$$

Значения векторов \tilde{J}^{gl} в определении множества $\tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ зависят только от размеров тайлов первого и второго уровней. Это является следствием принятого выше выбора параметров тайлинга. Формально тайлинг второго уровня выполняется независимо для каждого тайла в отдельности, поэтому в общем случае значения векторов \tilde{J}^{gl} могут зависеть от идентификатора J^{gl} соответствующего тайла первого уровня и от ассоциированных с ним параметров тайлинга второго уровня, в частности от выбора начальной точки $\tilde{J}^{\bar{0}}$.

Глобальные зависимости между тайлами. Наличие вектора $\phi \in \Phi$ для алгоритма с однородными зависимостями означает, что для любой пары точек $J, J + \phi \in V$ операции, приписанные точке $J + \phi$, информационно зависят от операций, приписанных точке J . При разбиении области вычислений на тайлы точки с информационно зависимыми операциями могут оказаться в двух разных тайлах – в таком случае между этими тайлами возникает информационная зависимость. Таким образом, существование информационной зависимости между операциями алгоритма обуславливает появление глобальной зависимости между тайлами.

Глобальные зависимости фактически определяют порядок выполнения операций алгоритма на уровне макроопераций. Кроме этого, при отображении макроопераций алгоритма на процессоры параллельной архитектуры глобальные зависимости естественным образом определяют коммуникации между процессорами. С практической точки зрения важно не только установить глобальные зависимости между тайлами, но и определить подмножества точек тайлов, которые обуславливают наличие этих зависимостей. Эти множества необходимы для определения конкретных данных, участвующих в коммуникации между процессорами, и определения их количества (коммуникационного объема).

Зависимости между тайлами можно характеризовать векторами глобальных зависимостей соответствующего уровня. Каждый вектор $\phi \in \Phi$ может порождать некоторое количество векторов глобальных зависимостей разных уровней.

О п р е д е л е н и е 2. Вектор $\phi^{gl} \in Z^n$ будем называть вектором глобальной зависимости первого уровня, порожденным вектором $\phi \in \Phi$, если существуют точки $J, J + \phi \in V$ и тайлы $J^{gl}, J^{gl} + \phi^{gl} \in V^{gl}$ такие, что $J \in T(J^{gl})$, $J + \phi \in T(J^{gl} + \phi^{gl})$.

Приведенное определение векторов глобальных зависимостей формально включает в себя случай, когда точки с информационно зависимыми операциями принадлежат одному и тому же тайлу и, как следствие, порождается нулевой вектор глобальной зависимости. Нулевой вектор зависимостей не имеет значения при организации взаимодействия между тайлами текущего первого уровня, но имеет существенное значение с точки зрения определения зависимостей между тайлами следующего, второго, уровня.

Множество векторов глобальных зависимостей первого уровня, порождаемых вектором $\varphi \in \Phi$, будем обозначать Φ_{φ}^{gl} . Очевидно, что имеется непосредственная связь между значениями векторов $\varphi \in \Phi$ и значениями векторов φ^{gl} . В следующем ниже утверждении сформулировано точное определение координат векторов глобальных зависимостей, а также соответствующих им множеств точек области вычислений, которые обуславливают наличие этих зависимостей. Утверждение фактически является компиляцией результатов, полученных ранее авторами данной работы. Результаты представлены вместе с доказательствами в работе [6].

Перед формулировкой утверждения необходимо ввести ряд обозначений и определений.

Обозначим x_+ (x_-) вектор, полученный из вектора $x \in Z^n$ заменой всех его отрицательных (положительных) координат нулями. В соответствии с этим множество точек $J \in V$ n -мерного параллелепипеда (7), для которых выполняется условие $J + \alpha \in V$, $\alpha \in Z^n$, можно определить как $V^{\alpha} = \{J \in Z^n \mid m - (H\alpha)_- \leq HJ \leq M - (H\alpha)_+\}$.

Для каждого тайла $J^{gl} \in V^{gl}$, вектора $\varphi \in \Phi$ и порождаемого им вектора $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$ определим следующие множества:

$V^{loc}(J^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{in} = \{J \in V^{-\varphi} \mid J \in T(J^{gl}), J - \varphi \in T(J^{gl} - \varphi^{gl})\}$ – множество точек тайла J^{gl} , принадлежащих области вычислений алгоритма и информационно зависимых от точек области вычислений, принадлежащих тайлу $J^{gl} - \varphi^{gl}$;

$V^{loc}(J^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{out} = \{J \in V^{\varphi} \mid J \in T(J^{gl}), J + \varphi \in T(J^{gl} + \varphi^{gl})\}$ – множество точек области вычислений, принадлежащих тайлу J^{gl} , операции которых непосредственно влияют на результат выполнения операций, приписанных точкам тайла $J^{gl} + \varphi^{gl}$.

У т в е р ж д е н и е 1. Пусть область вычислений алгоритма с однородными зависимостями представлена в виде (7), а параметры тайлинга H , R и $J^{\bar{0}}$ удовлетворяют условиям $J^{\bar{0}} = H^{-1}m$, $R^{-1}\bar{R}^{\max} \in Z^n$. Тогда векторы глобальных зависимостей первого уровня $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$, порожденные вектором $\varphi \in \Phi$, принимают значения, удовлетворяющие неравенству

$$\lfloor R^{-1}H\varphi \rfloor \leq \varphi^{gl} \leq \min\left(\lceil R^{-1}H\varphi \rceil, R^{-1}\bar{R}^{\max} - \bar{1}\right).$$

Глобальная зависимость между тайлами $J^{gl} \in V^{gl}$ и $J^{gl} + \varphi^{gl} \in V^{gl}$, порожденная вектором φ , обусловлена информационной зависимостью операций, которые приписаны точкам множеств

$$V^{loc}(J^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{out} = \left\{J \in V^{\varphi} \mid (R\varphi^{gl} - H\varphi)_+ \leq H(J - J^{\bar{0}, gl}) \leq \bar{R} - \bar{1} + (R\varphi^{gl} - H\varphi)_-\right\},$$

$$V^{loc}(J^{gl} + \varphi^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{in} = \left\{J \in V^{-\varphi} \mid (R\varphi^{gl} - H\varphi)_+ \leq H(J - \varphi - J^{\bar{0}, gl}) \leq \bar{R} - \bar{1} + (R\varphi^{gl} - H\varphi)_-\right\},$$

где $J^{\bar{0}, gl}$ – начальная точка тайла J^{gl} . Количество точек области вычислений, принадлежащих этим множествам, определяется формулой

$$\left|V^{loc}(J^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{out}\right| = \left|V^{loc}(J^{gl} + \varphi^{gl})_{\varphi, \varphi^{gl}}^{in}\right| = \prod_{i=1}^n (r_i - |r_i\varphi_i^{gl} - h_i\varphi|).$$

Очевидно, что векторы зависимостей $\varphi \in \Phi$ порождают зависимости не только между тайлами первого, но и второго уровня.

О п р е д е л е н и е 3. Пусть вектор $\varphi \in \Phi$ – фиксированный вектор зависимостей, а $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$ – порождаемый им вектор глобальной зависимости первого уровня. Вектор $\psi^{gl} = (\tilde{\varphi}^{gl}, \varphi^{gl}) \in Z^{2n}$ будем называть вектором глобальной зависимости второго уровня, порожденным векторами φ и φ^{gl} , если существуют точки J и $J + \varphi$ области вычислений V , принадлежащие соответственно тайлам $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ и $(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl} + \varphi^{gl})$.

Множество векторов глобальных зависимостей второго уровня, порождаемых парой векторов $\varphi \in \Phi$ и $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$, будем обозначать $\Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$.

В следующем ниже утверждении отражена связь между значениями векторов $\varphi \in \Phi$, $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$ и $\psi^{gl} \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$, а также явно определены множества точек области вычислений, которые обуславливают наличие глобальных зависимостей второго уровня. Предварительно введем обозначения и определения, необходимые для формулировки утверждения.

Для каждого тайла второго уровня $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl})$, $J^{gl} \in V^{gl}$, вектора $\varphi \in \Phi$ и порождаемых им векторов $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$ и $\psi^{gl} \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$ определим следующие множества:

$V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{in} = \left\{ J \in V^{-\varphi} \mid J \in T(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}), J - \varphi \in T(\tilde{J}^{gl} - \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} - \varphi^{gl}) \right\}$ – множество точек тайла (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) , принадлежащих области вычислений алгоритма и информационно зависимых от точек области вычислений, принадлежащих тайлу $(\tilde{J}^{gl} - \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} - \varphi^{gl})$;

$V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{out} = \left\{ J \in V^{\varphi} \mid J \in T(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}), J + \varphi \in T(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl}) \right\}$ – множество точек области вычислений, принадлежащих тайлу (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) , операции которых непосредственно влияют на результат выполнения операций, приписанным точкам тайла $(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl})$.

У т в е р ж д е н и е 2. Пусть область вычислений алгоритма с однородными зависимостями представлена в виде (7), а параметры тайлинга первого и второго уровня удовлетворяют условиям $J^{\bar{0}} = H^{-1}m$, $R^{-1}\bar{R}^{\max} \in Z^n$, $\tilde{J}^{\bar{0}} = H^{-1}(m + RJ^{gl})$, $\bar{R}^{-1}\bar{R} \in Z^n$. Тогда векторы глобальных зависимостей второго уровня $\psi^{gl} \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$, порожденные парой векторов $\varphi \in \Phi$ и $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$, принимают значения, удовлетворяющие неравенству

$$\max\left(\left\lfloor \bar{R}^{-1}H\varphi \right\rfloor - \bar{R}^{-1}R\varphi^{gl}, -\bar{R}^{-1}\bar{R} + \bar{1}\right) \leq \tilde{\varphi}^{gl} \leq \min\left(\left\lceil \bar{R}^{-1}H\varphi \right\rceil - \bar{R}^{-1}R\varphi^{gl}, \bar{R}^{-1}\bar{R} - \bar{1}\right).$$

Глобальная зависимость между тайлами $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ и $(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl} + \varphi^{gl})$, порожденная вектором φ , обусловлена информационной зависимостью операций, соответствующих точкам множеств $V^{out} = V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{out}$ и $V^{in} = V^{loc}(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{in}$:

$$V^{out} = \left\{ J \in V^{\varphi} \mid \left(\bar{R}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi \right)_+ \leq H\left(J - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}\right) \leq \bar{R} - \bar{1} + \left(\bar{R}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi \right)_- \right\},$$

$$V^{in} = \left\{ J \in V^{-\varphi} \mid \left(\bar{R}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi \right)_+ \leq H\left(J - \varphi - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}\right) \leq \bar{R} - \bar{1} + \left(\bar{R}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi \right)_- \right\},$$

где $\tilde{J}^{\bar{0}, gl}$ – начальная точка тайла (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) . Количество точек области вычислений, принадлежащих этим множествам, определяется формулой

$$\left| V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{out} \right| = \left| V^{loc}(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{in} \right| = \prod_{i=1}^n \left(\tilde{r}_i - \left| \tilde{r}_i \tilde{\varphi}_i^{gl} + r_i \varphi_i^{gl} - h_i \varphi \right| \right).$$

Доказательство. Пусть $\psi^{gl} \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$ – вектор глобальной зависимости второго уровня, порожденный парой векторов $\varphi \in \Phi$ и $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$. В соответствии с определением 3 векторов зависимостей второго уровня, это означает, что в области вычислений алгоритма существуют точки J и $J + \varphi$, принадлежащие соответственно тайлам $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ и $(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl} + \varphi^{gl})$, $J^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl} \in V^{gl}$, что в силу предположений о параметрах тайлинга и определения множества точек тайла в виде (11) равносильно выполнению двух неравенств:

$$\begin{aligned} \bar{0} &\leq H(J - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}) \leq \tilde{\bar{R}} - \bar{1}, \\ \tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi &\leq H(J - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}) \leq \tilde{\bar{R}} - \bar{1} + \tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\tilde{J}^{\bar{0}, gl}$ – начальная точка тайла (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) . Одновременное выполнение этих неравенств эквивалентно неравенству

$$\max(\bar{0}, \tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi) \leq H(J - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}) \leq \min(\tilde{\bar{R}} - \bar{1}, \tilde{\bar{R}} - \bar{1} + \tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi),$$

или, что то же самое, неравенству

$$(\tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi)_+ \leq H(J - \tilde{J}^{\bar{0}, gl}) \leq \tilde{\bar{R}} - \bar{1} + (\tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi)_-.$$

Из последнего неравенства следует оценка для модулей координат вектора $\tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi$:

$$\left| (\tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} + R\varphi^{gl} - H\varphi)_k \right| \leq \tilde{r}_k - 1, \quad 1 \leq k \leq n.$$

Раскрывая модуль в виде двойного неравенства и выражая координаты вектора $\tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl}$, получаем

$$H\varphi - R\varphi^{gl} - \tilde{\bar{R}} + \bar{1} \leq \tilde{\bar{R}}\tilde{\varphi}^{gl} \leq H\varphi - R\varphi^{gl} + \tilde{\bar{R}} - \bar{1}.$$

Умножая полученное неравенство на обратную матрицу $\tilde{\bar{R}}^{-1}$, с учетом целочисленности вектора $\tilde{\bar{R}}^{-1}\tilde{\bar{R}}$, получаем соотношение, которому удовлетворяют компоненты вектора ψ^{gl} :

$$\left[\tilde{\bar{R}}^{-1}H\varphi \right] - \tilde{\bar{R}}^{-1}R\varphi^{gl} \leq \tilde{\varphi}^{gl} \leq \left[\tilde{\bar{R}}^{-1}H\varphi \right] - \tilde{\bar{R}}^{-1}R\varphi^{gl}.$$

С учетом определения множества $\tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ в виде (12) имеем неравенство $-\tilde{\bar{R}}^{-1}\tilde{\bar{R}} + \bar{1} \leq \tilde{\varphi}^{gl} \leq \tilde{\bar{R}}^{-1}\tilde{\bar{R}} - \bar{1}$, что в сочетании с предыдущим неравенством приводит к получению сформулированного в утверждении соотношения, связывающего компоненты вектора ψ^{gl} с вектором φ .

Множество точек тайла (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) , операции которых непосредственно влияют на результат выполнения операций, приписанных точкам тайла $(\tilde{J}^{gl} + \tilde{\varphi}^{gl}, J^{gl} + \varphi^{gl})$, т. е. множество V^{out} , определяется как совокупность целочисленных решений системы, составленной из неравенств (13). Из этих же соотношений, с учетом унимодулярности матрицы H , следует оценка мощности множества V^{out} . Аналогичным образом, с помощью формулы (11), определяется вид и оценка мощности множества V^{in} . Утверждение доказано.

Отображение алгоритма на параллельную архитектуру. Для параллельной реализации алгоритма необходимо решить задачу его пространственно-временного отображения на многопроцессорную вычислительную систему заданной конфигурации. Пространственное отображение заключается в распределении операций алгоритма и данных по процессорам (вычислитель-

ным процессам). Временное отображение состоит в определении порядка выполнения операций, отображенных на каждый из процессоров, и в согласовании параллельных вычислительных процессов между собой в случае необходимости взаимодействия между ними.

На практике параллельная реализация алгоритма проходит, как правило, в условиях ограниченности системных ресурсов. В первую очередь это ограничения на размер и размерность топологии параллельной архитектуры. В этом случае для организации параллельных вычислительных процессов применяются различные стратегии отображения алгоритма. Одной из известных и используемых стратегий является локально параллельная глобально последовательная стратегия отображения алгоритмов [8].

LPGS-стратегия определяет общий подход к отображению алгоритма на параллельную архитектуру и заключается в следующем: множество всех точек области вычислений алгоритма и, соответственно, его операций разбивается на непересекающиеся подмножества; каждое из полученных подмножеств точек области вычисления последовательно и в общем случае независимо отображается на всю параллельную архитектуру. С точки зрения временного отображения выполнение алгоритма происходит по двухуровневой схеме, включающей в себя глобальный уровень или уровень подмножеств операций алгоритма, полученных при разбиении области вычислений, и локальный уровень – уровень операций фиксированного подмножества. На глобальном уровне подмножества операций алгоритма последовательно выполняются на процессорах параллельной архитектуры. На локальном уровне в пределах одного подмножества операции алгоритма выполняются параллельно. Очевидно, что порядок выполнения алгоритма на обоих уровнях должен определяться в соответствии с зависимостями между операциями и их распределением по процессорам. Необходимо также отметить, что выбор разбиения области вычислений существенным образом влияет на решение задачи пространственно-временного отображения алгоритма и на потенциал к параллельной обработке в целом. Например, задача временного отображения на глобальном уровне существенно упрощается в случае, когда между подмножествами операций отсутствуют обратные связи.

Двухуровневый тайлинг по своей идее близок к LPGS-стратегии. Тайлинг первого уровня фактически соответствует разбиению области вычислений на глобальном уровне стратегии. Тайлинг второго уровня можно поставить в соответствие локальному уровню стратегии с учетом отображения операций алгоритма на процессоры. Такое соответствие дает возможность решения задачи пространственно-временного отображения в интеграции с тайлингом – общий принцип отображения алгоритма можно сформулировать следующим образом: на глобальном уровне параллельная вычислительная система последовательно выполняет тайлы первого уровня; на локальном уровне стратегии фиксированный тайл первого уровня разбивается на тайлы второго уровня, которые в свою очередь, как атомарные макрооперации, отображаются на процессоры и выполняются параллельно с учетом информационных зависимостей между ними. Такой интегрированный подход позволяет использовать математический аппарат двухуровневого тайлинга для решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов в рамках LPGS-стратегии и получать при этом ряд преимуществ, которые дает тайлинг как средство оптимизации программ.

Далее в разделе представлен формализованный метод решения задачи пространственно-временного отображения алгоритмов на параллельные архитектуры заданного размера и размерности. Метод разработан в рамках интегрированного подхода, предложенного выше, и предназначен для алгоритмов, область вычислений которых имеет форму n -мерного параллелепипеда вида (7).

Пусть целевая параллельная архитектура имеет размерность p и состоит из $l_1 \times l_2 \times \dots \times l_p$ процессорных элементов ПЭ (j_1, j_2, \dots, j_p) , координаты которых, как вектор, принадлежат множеству

$$\tilde{V}_p = \left\{ (j_1, j_2, \dots, j_p) \in Z^p \mid 0 \leq j_k \leq l_k - 1, k = 1, 2, \dots, p \right\}.$$

Определим параметры тайлинга первого уровня, положив $J^{\bar{0}} = H^{-1}m$ и выбрав в качестве диагональных элементов матрицы R делители соответствующих координат вектора $\bar{R}^{\max} = M - m + \bar{1}$. В качестве матрицы, задающей форму тайлов, используем матрицу H из определения области вычислений алгоритма (7).

Зафиксируем p -элементную упорядоченную выборку попарно различных элементов из множества целочисленных значений $\{1, 2, \dots, n\}$ и обозначим ее как множество $\{k_1, k_2, \dots, k_p\}$. В соответствии с этой выборкой определим параметры тайлинга второго уровня, исходя из условий $\tilde{H} = H$, $\tilde{J}^0 = H^{-1}(m + RJ^{gl})$, $\tilde{R}^{-1}\tilde{R} \in Z^n$ и дополнительного условия на размеры тайлов $\tilde{r}_{k_i} = r_{k_i}/l_i$, $i = 1, 2, \dots, p$. Такой выбор параметров тайлинга приводит к получению множества тайлов второго уровня $\tilde{V}^{gl}(J^{gl})$ в виде

$$\tilde{V}^{gl}(J^{gl}) = \left\{ (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in Z^{2n} \mid 0 \leq \tilde{J}_{k_i}^{gl} \leq l_i - 1, i = 1, 2, \dots, p, 0 \leq \tilde{J}_k^{gl} \leq r_k/\tilde{r}_k - 1, k \notin \{k_1, k_2, \dots, k_p\} \right\}.$$

Для пространственного отображения алгоритма необходимо определить функцию размещения, которая устанавливает соответствие между операциями алгоритма и процессорами, на которых они должны выполняться. Реализуемый в рамках метода принцип отображения алгоритмов и свойство атомарности тайлов позволяют задавать пространственное отображение не на множестве исходных операций алгоритма, а на множестве макроопераций второго уровня, что является более рациональным с точки зрения организации параллельных вычислительных процессов. Таким образом, пространственное отображение алгоритма будем задавать функцией размещения $g: Z^{2n} \rightarrow Z^p$ следующего вида:

$$g(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) = (\tilde{J}_{k_1}^{gl}, \tilde{J}_{k_2}^{gl}, \dots, \tilde{J}_{k_p}^{gl}), (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) \in \tilde{V}^{gl}(J^{gl}), J^{gl} \in V^{gl}. \quad (14)$$

Функция g ставит в соответствие каждому тайлу второго уровня процессор, на котором он должен выполняться как макрооперация. Данная функция реализует так называемый «координатный» способ отображения элементов $2n$ -мерного пространства в пространство меньшей размерности p . Координаты, по которым осуществляется отображение, непосредственно определяются выборкой $\{k_1, k_2, \dots, k_p\}$. Отображение вида (14) многовариантно; количество вариантов равно количеству различных выборок $\{k_1, k_2, \dots, k_p\}$, которое, в свою очередь, равно числу размещений из n по p .

В результате пространственного отображения тайлы второго уровня распределяются между процессорами параллельной архитектуры. Каждый процессор выполняет свой набор макроопераций второго уровня, последовательность которых в рамках одного процессора составляет один из параллельных процессов. Существование глобальных зависимостей между тайлами второго уровня в зависимости от выбранного варианта пространственного отображения может привести к необходимости организации обмена данными между параллельными процессами, протекающими на разных процессорах. Необходимость передачи данных возникает в том случае, когда информационно зависимые тайлы отображаются на разные процессоры. Таким образом, глобальные зависимости второго уровня порождают зависимости между процессорами. Очевидно, что для организации взаимодействия между параллельными процессами необходимо определить все зависимости между процессорами.

Рассматривая пары информационно зависимых тайлов второго уровня и их пространственное отображение в соответствии с функцией размещения вида (14), нетрудно показать, что зависимости между процессорами, по аналогии с зависимостями между операциями, определяются ненулевыми p -мерными векторами вида

$$d_{\psi^{gl}} = (\tilde{\varphi}_{k_1}^{gl}, \tilde{\varphi}_{k_2}^{gl}, \dots, \tilde{\varphi}_{k_p}^{gl}), \psi^{gl} = (\tilde{\varphi}^{gl}, \varphi^{gl}) \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}, \varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}, \varphi \in \Phi. \quad (15)$$

Векторы $d_{\psi^{gl}}$ фактически являются образами соответствующих векторов глобальных зависимостей второго уровня ψ^{gl} при их отображении функцией g в p -мерное пространство. Каждый вектор ψ^{gl} , у которого существует хотя бы одна ненулевая координата с номером из набора $\{k_1, k_2, \dots, k_p\}$, порождает вектор зависимостей на уровне процессоров. Необходимо заметить, что при применении предлагаемого метода отображения для однородных алгоритмов, с учетом

разбиения только на полные тайлы, свойство однородности зависимостей сохраняется не только на уровне тайлов, но и на уровне процессоров.

Временное отображение алгоритма будем осуществлять на множестве макроопераций в соответствии с LPGS-стратегией по предложенной выше двухуровневой схеме. Для реализации такого способа отображения на глобальном уровне необходимо установить порядок выполнения на параллельной вычислительной системе тайлов первого уровня. На локальном уровне требуется для каждого из процессоров определить порядок выполнения тайлов второго уровня, отображенных на него функцией размещения g и являющихся в совокупности фрагментом зафиксированного глобально тайла первого уровня. Таким образом, каждый процессор параллельной системы последовательно выполняет фрагменты тайлов первого уровня, которые представляют собой подмножества тайлов второго уровня, полученные при разбиении и отображении тайлов первого уровня на параллельную архитектуру. Кроме этого, для синхронизации параллельных процессов необходимо реализовать на уровне тайлов второго уровня передачу данных между процессорами в соответствии с векторами зависимостей $d_{\psi^{gl}}$.

Зафиксируем на множестве целых чисел $\{1, 2, \dots, n\}$ перестановку и обозначим ее $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$. На множестве чисел $\{t \in Z \mid 1 \leq t \leq n, t \notin \{k_1, k_2, \dots, k_p\}\}$ определим перестановку $\{t_1, t_2, \dots, t_{n-p}\}$.

В силу условия корректности тайлинга (6), которому удовлетворяет параметр H , векторы глобальных зависимостей первого уровня имеют неотрицательные координаты. Это следует непосредственно из формулы, определяющей значения координат векторов, приведенной в утверждении 1. Данный факт позволяет установить на множестве макроопераций первого уровня лексикографический порядок их выполнения в соответствии со значениями координат векторов J^{gl} , упорядоченных в соответствии с перестановкой $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$: тайл $J^{gl,1}$ выполняется раньше тайла $J^{gl,2}$, если существует $z \in N$, $1 \leq z \leq n$, такое что выполняются условия $J_{i_k}^{gl,1} = J_{i_k}^{gl,2}$, $k = 1, 2, \dots, z-1$, и $J_{i_z}^{gl,1} < J_{i_z}^{gl,2}$.

Глобальные зависимости между тайлами второго уровня в пределах фиксированного тайла первого уровня в соответствии с утверждением 2 также имеют неотрицательные координаты. Это позволяет установить лексикографический порядок выполнения макроопераций второго уровня на каждом процессоре по аналогии с глобальным уровнем отображения в соответствии с перестановкой $\{t_1, t_2, \dots, t_{n-p}\}$. Тогда процесс выполнения алгоритма на произвольном процессоре ПЭ(j_1, j_2, \dots, j_p), может быть представлен в рамках модели обмена сообщениями в виде псевдокода следующего вида:

```

for  $J_{i_1}^{gl} = 0$  to  $r_{i_1}^{\max} / r_{i_1} - 1$ 
  for  $J_{i_2}^{gl} = 0$  to  $r_{i_2}^{\max} / r_{i_2} - 1$ 
    ...
    for  $J_{i_n}^{gl} = 0$  to  $r_{i_n}^{\max} / r_{i_n} - 1$ 
      for  $\tilde{J}_{t_1}^{gl} = 0$  to  $r_{t_1} / \tilde{r}_{t_1} - 1$ 
        for  $\tilde{J}_{t_2}^{gl} = 0$  to  $r_{t_2} / \tilde{r}_{t_2} - 1$ 
          ...
          for  $\tilde{J}_{t_{n-p}}^{gl} = 0$  to  $r_{t_{n-p}} / \tilde{r}_{t_{n-p}} - 1$ 
            begin
              Receive data in directions  $d_{\psi^{gl}}$ ;
              Calculate tile  $(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})$ , where  $\tilde{J}_{k_i}^{gl} = j_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, p$ ;
              Send data in directions  $d_{\psi^{gl}}$ ;
            end
          end
        end
      end
    end
  end
end

```

Первые n циклов псевдокода реализуют лексикографический порядок выполнения тайлов первого уровня в соответствии с заданной перестановкой $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$, фиксируя при конкретных значениях счетчиков $J_{i_k}^{gl}, k=1, 2, \dots, n$, тайл первого уровня J^{gl} . Следующие за ними $n-p$ циклов описывают очередность выполнения тайлов второго уровня (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) , принадлежащих фиксированному тайлу первого уровня J^{gl} и отображенных на процессор $\text{ПЭ}(j_1, j_2, \dots, j_p)$. В теле полученного гнезда циклов фиксированные значения счетчиков $J_{i_k}^{gl}, k=1, 2, \dots, n$, и $\tilde{J}_{i_k}^{gl}, k=1, 2, \dots, n-p$, а также условие $\tilde{J}_{k_i}^{gl} = j_i, i=1, 2, \dots, p$, однозначным образом определяют для выполнения на процессоре $\text{ПЭ}(j_1, j_2, \dots, j_p)$ соответствующий тайл (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) .

В силу атомарности тайлов второго уровня все обмены данными, необходимые для выполнения тайла (\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) , осуществляются либо до, либо после выполнения макрооперации. Перед выполнением тайла необходимо осуществить ряд операций приема данных от процессоров по всем возможным направлениям, определяемым векторами $d_{\psi^{gl}}$, где $\psi^{gl} = (\tilde{\varphi}^{gl}, \varphi^{gl}) \in \Psi_{\varphi, \varphi^{gl}}^{gl}$, $\varphi^{gl} \in \Phi_{\varphi}^{gl}$, $\varphi \in \Phi$. Аналогичным образом после выполнения макрооперации процессор осуществляет по направлениям $d_{\psi^{gl}}$ передачу ее результатов. В случае приема данных по направлению $d_{\psi^{gl}}$ процессор получает данные от процессора $\text{ПЭ}(j_1 - \tilde{\varphi}_{k_1}^{gl}, j_2 - \tilde{\varphi}_{k_2}^{gl}, \dots, j_p - \tilde{\varphi}_{k_p}^{gl})$. В случае передачи результатов по направлению $d_{\psi^{gl}}$ процессор посылает данные процессору $\text{ПЭ}(j_1 + \tilde{\varphi}_{k_1}^{gl}, j_2 + \tilde{\varphi}_{k_2}^{gl}, \dots, j_p + \tilde{\varphi}_{k_p}^{gl})$.

Операции приема-передачи данных по своей актуальности и содержанию определяются в соответствии с векторами глобальных зависимостей второго уровня ψ^{gl} и их проекциями $d_{\psi^{gl}}$ на множество процессоров. В общем случае каждому вектору ψ^{gl} , для которого $d_{\psi^{gl}} \neq \bar{0}$, соответствует отдельная операция обмена данными. Конкретные данные, которые участвуют в операциях приема и передачи, определяются соответственно множествами $V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{in}$ и $V^{loc}(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})_{\varphi, \psi^{gl}}^{out}$. Мощность этих множеств обуславливает количество таких данных.

В предложенном подходе к решению задачи отображения алгоритм рассматривается на уровне макроопераций. Представленный псевдокод реализует исходный алгоритм также на уровне макроопераций. Для параллельной реализации алгоритма на уровне исходных операций необходимо дополнительно установить и программно реализовать порядок выполнения операций внутри тайла.

Матрица H , по определению тайлинга, должна удовлетворять условию (6). Это означает, что на множестве точек $J \in T(\tilde{J}^{gl}, J^{gl})$ можно установить лексикографический порядок выполнения приписанных им операций в соответствии со значением вектора HJ . Реализация порядка выполнения операций в программном коде представляет собой отдельную задачу.

В соответствии с формализованным подходом к тайлингу, представленным в данной работе, множество точек тайла образует параллелепипед вида (11). В случае, когда матрица тайлинга H является нижней треугольной с единицами на главной диагонали, параллелепипед имеет представление с явным определением зависимости граничных значений координат своих точек от параметров тайлинга, параметров, определяющих область вычислений и координат соответствующих точек с меньшими номерами:

$$T(\tilde{J}^{gl}, J^{gl}) = \left\{ J \in Z^n \mid \tilde{r}_k \tilde{J}_k^{gl} + r_k J_k^{gl} + m_k - \sum_{i=1}^{k-1} h_{ki} J_i \leq J_k \leq \tilde{r}_k \tilde{J}_k^{gl} + r_k J_k^{gl} + m_k + \tilde{r}_k - \sum_{i=1}^{k-1} h_{ki} J_i - 1 \right\}.$$

Такое представление множества точек тайла позволяет реализовать лексикографический порядок выполнения операций тайла в виде гнезда циклов

$$\begin{aligned} &\text{for } J_1 = \tilde{r}_1 \tilde{J}_1^{gl} + r_1 J_1^{gl} + m_1 \quad \text{to} \quad \tilde{r}_1 \tilde{J}_1^{gl} + r_1 J_1^{gl} + m_1 + \tilde{r}_1 - 1 \\ &\text{for } J_2 = \tilde{r}_2 \tilde{J}_2^{gl} + r_2 J_2^{gl} + m_2 - h_{21} J_1 \quad \text{to} \quad \tilde{r}_2 \tilde{J}_2^{gl} + r_2 J_2^{gl} + m_2 + \tilde{r}_2 - h_{21} J_1 - 1 \\ &\dots \\ &\text{for } J_n = \tilde{r}_n \tilde{J}_n^{gl} + r_n J_n^{gl} + m_n - \sum_{i=1}^{n-1} h_{ni} J_i \quad \text{to} \quad \tilde{r}_n \tilde{J}_n^{gl} + r_n J_n^{gl} + m_n + \tilde{r}_n - \sum_{i=1}^{n-1} h_{ni} J_i - 1 \end{aligned}$$

Calculate $S(J)$;

где $S(J)$ – операция алгоритма, ассоциированная с точкой J области вычислений V .

В общем случае формализацию порядка выполнения операций тайла можно выполнить за счет аффинного преобразования тайла матрицей H к n -мерному многограннику и применения метода исключения Фурье – Моцкина для генерации программного кода.

В заключение необходимо отметить, что вариативность порядка выполнения макроопераций первого и второго уровней не ограничивается вариантами перестановок $\{i_1, i_2, \dots, i_n\}$ и $\{t_1, t_2, \dots, t_{n-p}\}$. Корректным будет любой порядок, сохраняющий зависимости между макрооперациями. В качестве альтернативного подхода к упорядочиванию макроопераций, а также операций внутри тайла второго уровня, можно использовать аппарат векторных функций таймирования [9].

Работа выполнена в рамках подпрограммы «Математические методы» Государственной программы научных исследований «Конвергенция».

Список использованной литературы

1. Xue, J. Loop Tiling For Parallelism / J. Xue. – Norwell: Kluwer Academic Publishers, 2000.
2. Irigoien, F. Supernode partitioning / F. Irigoien, R. Triolet // Proceedings of the ACM SIGPLAN Symposium on Principles of Programming Languages, San Diego, California, Jan. 1988. – San Diego, 1988. – P. 319–329.
3. Parameterized tiled loops for free / L. Rengarayanan [et al.] // SIGPLAN Conf. on Programming Language Design and Implementation. – New York: ASM Press, 2007. – P. 405–414.
4. DynTile: Parametric Tiled Loop Generation for Parallel Execution on Multicore Processors / A. Hartono [et al.] // 24th International Parallel and Distributed Proc. Symposium (2010 IPDPS Conference), Atlanta, April 2010. – Atlanta, 2010.
5. Parametric tiling of affine loop nests / S. Tavarageri [et al.] // Proc. 15th Workshop on Compilers for Parallel Computers, Vienna, Austria, July 2010. – Vienna, 2010.
6. Баханович, С. В. Параметризованный тайлинг: точные аппроксимации и анализ глобальных зависимостей / С. В. Баханович, П. И. Соболевский // ЖВМ. – 2014. – Т. 54, № 11. – С. 1817–1828.
7. Primetile: A Parametric Multi-Level Tiler for Imperfect Loop Nests / A. Hartono [et al.] // Proc. of the 23rd Int. Conf. on Supercomputing (ICS'09). – P. 147–157.
8. Баханович, С. В. Отображение алгоритмов на параллельные архитектуры заданной размерности и заданного размера / С. В. Баханович, Н. А. Лиходед // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2003. – № 1. – С. 101–108.
9. Лиходед, Н. А. Получение аффинных преобразований для улучшения локальности гнезд циклов / Н. А. Лиходед, С. В. Баханович, А. В. Жерело // Программирование. – 2005. – № 5. – С. 52–65.

Поступила в редакцию 28.04.2016

УДК 681.32

Л. Д. ЧЕРЕМИСИНОВА

МОДЕЛИ И АЛГОРИТМЫ ОЦЕНИВАНИЯ СРЕДНЕГО ЗНАЧЕНИЯ МОЩНОСТИ, ПОТРЕБЛЯЕМОЙ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТНЫМИ КМОП-СХЕМАМИ

*Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь,
e-mail: cld@newman.bas-net.by*

Рассматривается задача оценки среднего значения мощности, потребляемой КМОП-схемой с памятью, путем динамического и статического анализа схем. Основу методов первого класса составляют процедуры построения тестовых последовательностей, обеспечивающих вычисление среднего значения переключательной активности схемы. Методы второго класса основаны на вычислении вероятностных характеристик сигналов на полюсах схемы.

Ключевые слова: проектирование схем с низким энергопотреблением, КМОП-технология, оценка рассеивания мощности, переключательная активность.

L. D. CHEREMISINOVA

MODELS AND ALGORITHMS FOR ESTIMATION OF AVERAGE POWER CONSUMED BY SEQUENTIAL CMOS CIRCUITS

*United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus,
e-mail: cld@newman.bas-net.by*

The problem of estimation of the power consumed by the CMOS circuit with memory is considered with the use of the static and dynamic circuit analysis. The procedures of forming test sequences, which provide the calculation of the average circuit switching activity, underlie the first-type methods. The second-type methods are based on the calculation of the probability characteristics of the circuit nodes signals.

Keywords: low-power design, CMOS technology, power dissipation evaluation, switching activity.

Введение. Проектированию схем с малым энергопотреблением придается все большее значение в связи с тем, что рассеивание энергии становится камнем преткновения при дальнейшем повышении уровня интеграции, а также в связи с расширением рынка портативных устройств с автономным питанием, для которых очень важно увеличить время автономной работы без подзарядки. От величины потребляемой микросхемой мощности зависят такие важные параметры портативных устройств, как мощность источника питания, размер шин питания, требования к системе охлаждения, время разрядки аккумуляторной батареи, а, следовательно, и время работы мобильных систем без перезарядки батареи.

При обсуждении вопроса, какая энергия (мощность) затрачивается при работе микросхемы, понятия потребляемой и рассеиваемой мощности, как правило, считаются синонимами. В принципе, следует различать понятия энергии и мощности. Потребляемая микросхемой мощность зависит от тактовой частоты и может быть сокращена за счет ее уменьшения. Однако в этом случае на выполнение одних и тех же вычислений потребуется большее время, и соответственно расход мощности питающей батареи не уменьшится. Отсюда правильнее было бы говорить о важности снижения энергопотребления, а не потребляемой мощности. Учитывая, что далее можно считать, что тактовая частота проектируемой схемы неизменна, снижение потребляемой мощности означает и снижение энергопотребления.

Разработке методов и программных средств, помогающих проектировщику оптимизировать схемы по потреблению мощности, придается в настоящее время большое значение.

© Черемисинова Л. Д., 2016

Необходимыми составляющими этих средств являются программы оценки прогнозируемого энергопотребления схем в процессе их проектирования на разных этапах: не только на конечном – схмотехническом уровне (на уровне транзисторов), но и на более высоких – логическом и алгоритмическом. Это обусловлено тем, что в процессе оптимизации схем, например, на логическом уровне, проектировщику важно знать, как повлияет выбор того или иного варианта оптимизации и синтеза схем на потребление мощности результирующей схемой. Наличие средств прогнозной оценки даст возможность выбрать наиболее подходящие варианты оптимизации и избежать процедуры перепроектирования схемы.

На этапе логического проектирования одной из важных задач является быстрая оценка энергопотребления схемы с тем, чтобы оперативно оценивать варианты реализации цифровых схем в процессе их проектирования. Схмотехническое моделирование, давая близкие к реальным оценки потребления мощности схемой, достаточно трудоемко и имеет жесткие ограничения на сложность схем, подлежащих анализу. В связи с этим его целесообразно использовать на завершающем этапе проектирования, когда требуется с большой точностью определить характеристики схемы по энергопотреблению в разных режимах ее использования.

Для компонентов СБИС, выполненных по КМОП-технологии, около 80 % всей потребляемой мощности приходится на динамическую составляющую [1–5], порождаемую переключением сигналов на выходах узлов микросхемы, поэтому на логическом уровне энергопотребление может оцениваться переключательной активностью узлов схемы.

Известны два подхода к оценке энергопотребления схем [3–6]:

– методы, основанные на динамическом анализе, в основе которых лежит моделирование схем на тестовой последовательности входных воздействий;

– методы, основанные на статическом анализе, в основе которых лежит вычисление вероятностных характеристик сигналов на полюсах схемы.

Первый подход предполагает моделирование исследуемой схемы на множестве возможных сценариев ее функционирования (упорядоченных последовательностей наборов значений сигналов на ее входах). Для выполнения моделирования необходимо задать последовательность тестовых воздействий, которая позволит оценить потребление мощности схемы в заданном режиме ее работы. Для получения достоверной оценки энергопотребления необходимо рассмотреть большое число входных воздействий, что делает использование методов оценки энергопотребления на основе моделирования затруднительным для сложных схем. Кроме того, эти методы не годятся для использования в процессе проектирования схемы, когда ее окружение также еще не спроектировано или даже не определено. В этом случае практически ничего не известно о возможных ее входных воздействиях. В таких случаях оправдано использование статических методов, базирующихся на вероятностном подходе к определению переключательной активности сигналов. Эти методы основаны на вероятностных характеристиках входных сигналов и функционально-структурных свойствах исследуемой схемы, что обеспечивает компактное, но опосредованное описание последовательности входных воздействий.

В настоящей работе рассматривается задача вычисления оценки среднего значения потребляемой мощности в наиболее общей постановке – для схем с памятью. Рассматриваются следующие случаи: 1) имеется только описание схемы с памятью, вероятностные характеристики входных сигналов неизвестны; 2) имеется описание схемы с памятью и заданы вероятностные характеристики входных сигналов; 3) для схемы с памятью имеется автоматное описание и заданы вероятностные характеристики входных сигналов.

Соответственно этим случаям в данной работе рассматриваются подходы к оценке среднего потребления мощности на основе динамического и статического анализа поведения схем. В основе первого лежит моделирование схем на последовательности входных воздействий, второго – вычисление вероятностных характеристик сигналов на полюсах схемы.

1. Подходы к оценке среднего значения потребляемой мощности. При использовании для оценки потребления мощности методов на основе моделирования основная проблема заключается в определении априори статистически значимого числа стимулирующих воздействий, их

значений и порядка следования. Множество тестовых векторов может быть сгенерировано псевдослучайным способом или с помощью направленных методов.

Наиболее разработанным подходом к динамической оценке потребляемой мощности на основе моделирования является использование метода Монте-Карло [7–8]. Динамические методы, дающие достоверные оценки потребляемой мощности КМОП-схемой, с одной стороны, требуют исследования схемы на большом числе входных воздействий, что имеет результатом чрезмерное время выполнения, а с другой – достаточно точно позволяют оценить потребляемую мощность на заданном множестве тестовых воздействий. Таким образом, если подобрана достаточно представительная (для заданного применения тестируемой схемы) тестовая последовательность, то с помощью моделирования может быть получена достоверная оценка потребляемой мощности для тестируемой КМОП-схемы.

Таким образом, основной проблемой при динамической оценке потребляемой мощности является построение такой тестовой последовательности входных векторов, которая была бы типичной для штатного режима функционирования тестируемой схемы.

Вероятностный подход к определению переключательной активности сигналов, лежащий в основе статических методов оценки потребляемой мощности КМОП-схемой, основан на вероятностных характеристиках входных сигналов и функционально-структурных свойствах исследуемой схемы. Подход предполагает задание значений вероятностей переключения сигналов на входах схемы, которые отражают частоты смены значений соответствующих сигналов. Методы основаны на распространении вероятностной информации о смене значений сигналов через всю схему, от входов к выходам [9].

Вероятностные методы хотя и уступают методам на основе моделирования по степени соответствия реальному поведению схемы, однако позволяют достаточно просто оценить, как часто сигналы на выходах узлов схемы меняют свои значения, и использовать эту информацию для оценки динамической составляющей потребляемой мощности. Именно этот подход к оценке энергопотребления дает возможность сравнивать варианты реализации схемы в процессе ее проектирования, что уже на логическом уровне направляет процесс проектирования к получению схемы с низким энергопотреблением.

Большая часть энергии статических КМОП-схем потребляется во время зарядки и разрядки емкостной нагрузки. Вычисление переключательных активностей узлов для реальных схем весьма трудоемкая процедура, требующая учета множества факторов, возможных при функционировании схемы. Для того чтобы оценить потребление энергии логической схемой, достаточно вычислить переключательные активности ее внутренних полюсов.

Используемые в практике проектирования вероятностные оценки переключательной активности схемы выведены, как правило, в предположениях нулевой и ненулевой задержки сигнала узлами схемы [4, 5, 9]. Первые модели оценки предполагают, что все изменения на входах схемы распространяются через все ее элементы мгновенно и, значит, одновременно. Вторые модели оценок предполагают, что элементы схемы имеют конечные (но не нулевые) задержки, и принимают во внимание дополнительные переключения, которые не предусмотрены функцией, реализуемой узлом, и обусловлены переходными процессами, происходящими во время смены значений сигналов на входе до тех пор, пока узел не установится в конечное устойчивое состояние. Паразитные переходы часто возникают в тех точках схемы, где сходятся ветки схемы с разбалансированными по отношению друг к другу задержками относительно входа схемы. Переключения, обусловленные переходными процессами, также потребляют энергию, не выполняя при этом предусмотренных схемой вычислений. Первую компоненту энергопотребления, вызванную сменой значения на входе схемы и предписанную функцией, реализуемой узлом схемы, иногда называют функциональной активностью, а вторую – паразитной.

Использование моделей реальных задержек существенно повышает время вычисления оценок переключательной активности схемы, одновременно повышая их точность. В работе [10] показано, что отношение паразитного потребления мощности к суммарной потребляемой мощности меняется в достаточно широких пределах для разных схем (от 9 до 38 %) и особенно велико в некоторых специальных схемах обработки данных (например, в умножителях). Учитывая

трудоемкость вычисления реальной переключательной активности схемы, упомянутую погрешность вычислений можно считать допустимой, особенно в случае вычисления этих оценок для использования в процессе синтеза логической схемы.

Оценка переключательной активности некоторого i -го полюса схемы основана на вычислении его сигнальной вероятности p_i – вероятности появления на нем сигнала 1. При этом, как правило, предполагается, что для полюсов схемы имеет место пространственная и временная независимость [4, 9]. Первая предполагает отсутствие корреляции сигналов на разных полюсах. Она может возникать, когда пространственно связанные сигналы зависят друг от друга, что вызывается, например, наличием разветвлений на выходах элементов или обратных связей, но на практике между сигналами может существовать устойчивая зависимость, вызываемая и другими причинами. Вторая предполагает, что значение сигнала в любом такте синхронизации не зависит от его значений в предшествующих тактах.

В литературе предложено множество вероятностных методов оценки энергопотребления логических схем [11], основная масса из них применима только для комбинационных схем. Методы оценки энергопотребления сформулированы:

- относительно разных предположений о задержке сигналов узлами схемы (с нулевыми, единичными и реальными задержками);
- относительно разных предположений о возможности разных видов зависимостей между сигналами (пространственно независимыми и зависимыми);
- с учетом и без учета переходных процессов при смене сигнала и т. д.;
- с использованием разных статистических характеристик (вероятности появления сигнала 1, вероятности смены сигнала на полюсе, интенсивностей переключений сигналов – плотностей переключений сигналов, равновесных вероятностей, вероятностных форм сигналов и т. д.);
- с использованием разных моделей (на основе бинарных диаграмм решений (БДР, от англ. Binary Decision Diagram – BDD), коэффициентов корреляции).

Таким образом, статические методы оценки потребляемой мощности за счет использования аналитических приближенных методов и оценок позволяют значительно ускорить процесс получения оценки потребления мощности за счет уменьшения точности и могут быть использованы в процессе проектирования КМОП-схем.

Наряду с упомянутыми подходами развиваются гибридные методы, например вероятностного моделирования [12], в которых исходное задание последовательности наборов диаграмм входных сигналов заменяется вероятностными диаграммами входных сигналов. Вероятностная диаграмма представляет собой последовательность значений, задающих вероятности, с которыми сигнал принимает значение 1 для определенного интервала времени, а также вероятности смены его значения с 0 на 1 для определенных моментов времени. Вероятностная диаграмма входных сигналов позволяет вычислить усредненные диаграммы тока через узлы схемы за один шаг моделирования, по которым и определяется среднее энергопотребление элементов и схемы в целом.

2. Особенности оценки потребляемой мощности для схем с памятью. Большинство известных в литературе методов вычисления оценок рассеивания мощности предложены для случая комбинационных схем. Процедуры получения аналогичных оценок для последовательностных схем (с памятью) отличаются от процедур, предложенных для схем без памяти. Если в первой постановке задача оценки рассеивания мощности КМОП-схемой на основе динамического анализа сводится к поиску тестовой последовательности наборов входных сигналов, которые последовательно подаются на входы схемы, и в итоге к подсчету числа переключений значений сигналов на выходах элементов схемы, то во второй постановке, в случае последовательностных схем, приходится учитывать также и тот факт, что картина переключений существенно зависит от состояния, в которой схема находится перед подачей тестовой последовательности. Соответственно, в принципе, одна и та же тестовая последовательность наборов входных сигналов должна использоваться для моделирования последовательностной схемы столько раз, каково число возможных состояний элементов памяти. А оно равно 2^k , где k – число элементов памяти. При этом следует учитывать и тот факт, что начальные состояния элементов памяти должны соответство-

вать достижимым состояниям тестируемой последовательностной схемы (состояниям, которые возможны при функционировании).

Тестовая последовательность наборов для последовательностной схемы задается парой – начальное состояние элементов памяти последовательностной схемы и последовательность входных воздействий на схему, что представляется множеством $(s, x_1, x_2, \dots, x_i)$, где s – вектор значений внутренних переменных (соответствующих выходам элементов памяти), x_i – вектор значений входных сигналов, подаваемых на входы схемы на i -м такте ее работы. Вектор s имеет длину, равную числу триггеров в блоке памяти схемы, векторы x_i – длину, равную числу n входных полюсов схемы. Начальное состояние элементов памяти назначается самим проектировщиком либо выбирается случайным образом из числа достижимых состояний, либо находится с помощью алгоритмических средств [13–15]. Задается также число n -разрядных векторов тестовой последовательности (x_1, x_2, \dots, x_i) (верхняя граница которого 2^n). Векторы генерируются псевдослучайным образом.

3. Оценка среднего значения потребляемой мощности схем с памятью на основе моделирования. Случай 1. Рассмотрим случай, когда имеется только схема с памятью и ничего не известно о том, как (по какому закону) изменяются значения сигналов на ее входах. Как правило, в таком случае n -разрядные векторы, входящие в тестовую последовательность (x_1, x_2, \dots, x_i) , выбираются из булева пространства E^n мощности 2^n случайным образом. Качество оценки энергопотребления зависит от размера теста – чем он больше, тем точнее возможно оценить энергопотребление схемы.

Если условия использования устройства (характер входной последовательности сигналов) не оговорены, то наиболее эффективными будут псевдослучайные тесты или тесты полного перебора [16]. Тесты полного перебора включают в себя все упорядоченные пары входных наборов из булева пространства размерности n , такие, что смежные элементы в них будут представлены ровно по одному разу [17]. Размер такого теста $t = 2^n(2^n - 1) + 1$. Причем число тестовых наборов быстро возрастает с увеличением числа n входных полюсов схемы: для $n = 5, 6, 7, 8, 9, 10, \dots$ $t = 993, 4033, 16257, 65281, 261633, 1047553, \dots$ Очевидно, что для сложных схем единственным методом является метод случайного выбора заданного разумного числа тестовых наборов.

Недостаток такого подхода заключается в том, что при этом способе выбора тестовых векторов может получиться неравномерное покрытие ими пространства E^n возможных наборов значений сигналов на входе схемы. Более перспективным представляется выбор l тестовых векторов таким образом, чтобы они были равномерно распределены в булевом пространстве E^n .

Основная идея такого подхода – генерировать не псевдо-, а квазислучайную тестовую последовательность [18]. Квазислучайными, в отличие от псевдослучайных, называют равномерно распределенные последовательности, элементы которых не обладают свойством независимости, но имеют хорошую асимптотику, позволяющую использовать эти последовательности в методе Монте-Карло. Кроме того, такие последовательности позволяют достаточно равномерно охватить все пространство возможных векторов значений входных переменных для любого заданного размера l этой последовательности. Доказано, что квазислучайная последовательность равномерно распределена, каждое очередное значение тестового набора не зависит от предыдущих и, если все булево пространство из 2^n n -разрядных векторов разбить на равновеликие части, то в каждой из них окажется примерно одинаковое число векторов из построенной последовательности.

Для генерации квазислучайных тестовых последовательностей можно использовать метод построения одномерных последовательностей Соболя [18, 19], модифицированный И. А. Антоновым и А. М. Салеем [20].

Числа Соболя выбираются из интервала от 1 до 2 в степени минус 1. Если рассматриваются n -разрядные двоичные числа, то генерируются числа в интервале $[1, 2^n - 1]$. Одномерная последовательность Соболя [21] генерируется исходя из набора специальных n -разрядных булевых векторов, называемых направляющими числами: (v_1, v_2, \dots, v_n) , которые вычисляются на основе выбора некоторого примитивного (по модулю 2) полинома

$$x^s + a_1x^{s-1} + a_2x^{s-2} + \dots + a_{s-1}x + 1,$$

где $a_i \in \{0, 1\}$ – фиксированные коэффициенты. Многочлены определяются заданием степени s и вектора значений коэффициентов $a = (a_1, a_2, \dots, a_{s-1})_2$ ($a_i \in \{0, 1\}$).

Направляющие числа v_i определяются коэффициентами выбранного полинома. За каждый из n разрядов двоичного представления числа отвечает одно направляющее число: для v_k только k левых битов могут быть равны 1 и k -й разряд равен 1.

В качестве значений первых s направляющих чисел v_k могут быть выбраны числа $m_k/2^k$, где m_k – нечетное число, меньшее 2^k . Значения остальных направляющих чисел v_p (где $p > s$) находятся рекуррентно, через уже выбранные s чисел v_i и коэффициенты полинома:

$$v_p = a_1 v_{p-1} \oplus a_2 v_{p-2} \oplus \dots \oplus a_{s-1} v_{p-s+1} \oplus v_{p-s} \oplus v_{p-s}/2^s, \quad (1)$$

где \oplus – поразрядная операция дизъюнкция с исключением. При этом направляющее число v_{p-s} сдвигается вправо s битов, а затем выполняется поразрядная дизъюнкция с исключением с уже вычисленными несдвинутыми направляющими числами. Очередное k -е n -разрядное число, входящее в тестовую последовательность, генерируется в виде

$$\mathbf{x}_k = d_1 v_1 \oplus d_2 v_2 \oplus \dots, \quad (2)$$

где d_i – i -я справа цифра (0 или 1) в двоичном представлении числа $k = (\dots d_3 d_2 d_1)_2$, $d_i \in \{0, 1\}$ и через $(p)_2$ обозначено двоичное представление числа p .

Например, возьмем примитивный полином степени $s = 3$ с коэффициентами $a_1 = 0$, $a_2 = 1$:

$$x^3 + x + 1.$$

Если выбрать $v_1 = 1/2 = (0,1)_2$, $v_2 = 3/2^2 = (0,11)_2$, $v_3 = 7/2^3 = (0,111)_2$, то из формулы (1) могут быть вычислены и другие направляющие числа: $v_4 = (0,0101)_2$, $v_5 = (0,00111)_2$, $v_6 = (0,101011)_2$, $v_7 = (0,0110001)_2, \dots$

Имея значения направляющих чисел и используя формулу (2), можно вычислить элементы \mathbf{x}_i одномерной последовательности Соболя, например:

$$\begin{array}{llll} k = 0 = (0)_2 & \mathbf{x}_0 = 0, & k = 1 = (1)_2 & \mathbf{x}_1 = (0,1)_2, \\ k = 2 = (10)_2 & \mathbf{x}_2 = (0,11)_2, & k = 3 = (11)_2 & \mathbf{x}_3 = (0,1)_2 \oplus (0,11)_2 = (0,01)_2, \\ k = 4 = (100)_2 & \mathbf{x}_4 = (0,111)_2, & k = 5 = (101)_2 & \mathbf{x}_5 = (0,1)_2 \oplus (0,111)_2 = (0,011)_2, \\ k = 6 = (110)_2 & \mathbf{x}_6 = (0,11)_2 \oplus (0,111)_2 = (0,001)_2, & & \end{array} \quad (3)$$

что порождает следующую тестовую последовательность:

$$\mathbf{x} = \{100, 110, 010, 111, 011, 001\}.$$

Сложность вычисления элементов последовательности можно сократить, если использовать в (2) не двоичный код номера элемента последовательности, а код Грея. Тогда очередной элемент последовательности получается из предыдущего путем использования только одной операции дизъюнкция с исключением, так как соседние кодовые слова Грея i -е и $(i+1)$ -е отличаются только одним разрядом, а именно разрядом, номер которого равен номеру первой справа цифры 0 в двоичном представлении числа $(i)_2$. Например, $\mathbf{x}_2^g = 011$ и $\mathbf{x}_3^g = 010$ отличаются в разряде 1 (первая справа цифра 0 в двоичном представлении $(2)_2 = 010$ числа 2 также имеет номер 1).

При записи числа \mathbf{x}_k в коде Грея формула (2) заменится формулой

$$\mathbf{x}_k^g = g_1 v_1 \oplus g_2 v_2 \oplus \dots, \quad (4)$$

где \oplus – поразрядная операция дизъюнкция с исключением, g_i – i -я справа цифра (0 или 1) в коде Грея числа $k = (\dots k_3 k_2 k_1)_2$, ($k_i \in \{0, 1\}$), v_i – i -е направляющее число.

Используя свойство кода Грея, заключающееся в том, что $\text{gray}(k)$ and $\text{gray}(k+1)$ различаются в одном разряде, формулу (4) можно также расписать рекурсивно как

$$\mathbf{x}_0^g = 0,0, \quad \mathbf{x}_k^g = \mathbf{x}_{k-1}^g \oplus v_{c_{k-1}}, \quad k \geq 1, \quad (5)$$

где c_k – индекс первого справа нуля в двоичном представлении числа $k = (\dots k_2 k_1)_2$. Как видно из двоичных представлений чисел (3), значения индексов c_i изменяются следующим образом: $c_0 = 1$, $c_1 = 2$, $c_2 = 1$, $c_3 = 3$, $c_4 = 1$, $c_5 = 2$, и т. д.

Для заданной длины p кода множество значений индексов c_i получается рекурсивно [22]:

$$C_1 = \{1\}; \quad C_p = C_{p-1} \cup \{p\} \cup C_{p-1}, \quad p \geq 2.$$

Например, для $p = 5$ получается $C_5 = \{1, 2, 1, 3, 1, 2, 1, 4, 1, 2, 1, 3, 1, 2, 1, 5, 1, 2, 1, 3, 1, 2, 1, 4, 1, 2, 1, 3, 1, 2, 1\}$.

Следует отметить, что использование кодов Грея (вместо двоичных кодов) при построении последовательности И. А. Антоновым и А. М. Салеем [20], приводит к построению той же последовательности кодов, что и в последовательности Соболя, но только порядок их следования будет другим. Например, первые семь кодов тестовой последовательности (используя формулу (5), найденные выше направляющие числа и числа C_5) будут следующими: $\mathbf{x} = \{100, 010, 110, 001, 101, 011, 111\}$, исходя из $\mathbf{x}_1^g = (0,1)_2$, $\mathbf{x}_2^g = (0,1)_2 \oplus (0,11)_2 = (0,01)_2$, $\mathbf{x}_3^g = (0,01)_2 \oplus (0,1)_2 = (0,11)_2$, $\mathbf{x}_4^g = (0,11)_2 \oplus (0,111)_2 = (0,001)_2$, $\mathbf{x}_5^g = (0,001)_2 \oplus (0,1)_2 = (0,101)_2$, $\mathbf{x}_6^g = (0,101)_2 \oplus (0,11)_2 = (0,011)_2$, $\mathbf{x}_7^g = (0,011)_2 \oplus (0,1)_2 = (0,111)_2$.

Примитивные полиномы разных степеней и вычисленные значения направляющих чисел можно найти в открытом доступе [21]. Аналогично можно хранить уже найденные элементы квазислучайной последовательности, дополняя их, если понадобится. В работе [23] представлены направляющие числа (двоично-рациональные дроби в двоичной системе), позволяющие генерировать ЛП₇-последовательности Соболя для аппроксимирования интегралов размерностью до 1111. Данные направляющие числа генерируют ЛП₇-последовательности, удовлетворяющие свойству A . Однако двумерные проекции этих последовательностей могут иметь неудовлетворительные характеристики равномерности [21]. Приведенные в работе [23] ЛП₇-последовательности позволяют решить эту проблему. Полученная размерность – 21201. Компания «BRODA» [24], занимающаяся разработкой и распространением многомерных LDS-генераторов, предлагает разработанный проф. И. М. Сободем SobolSeq370 генератор, который генерирует последовательности для размерности – 370.

Таким образом, за основу алгоритма генерирования тестовой последовательности (x_1, x_2, \dots, x_i) n -разрядных векторов для оценки среднего значения потребляемой мощности схем взят метод генерации одномерных последовательностей Соболя, модифицированный И. А. Антоновым и А. М. Салеем. Для целей оценки рассеивания мощности схемой важным является порядок следования элементов тестовой последовательности, поэтому после получения квазислучайной последовательности ее элементы следует случайным образом переставить.

4. Оценка среднего значения рассеивания мощности на основе моделирования. Случай 2.

Рассмотрим случай, когда имеется схема с памятью и вероятностные характеристики входных сигналов. Для каждого входного сигнала x_i ($i \leq n$) задана сигнальная вероятность $p(x_i)$ – вероятность, с которой он принимает значение 1. Необходимо сгенерировать такую тестовую последовательность, вычисленные по которой значения вероятностей $p^*(x_i)$ отдельных входных сигналов совпадут (или будут близки) к заданным значениям $p(x_i)$.

В этом случае наиболее естественным методом генерации является следующий. Сначала генерируется псевдослучайная или квазислучайная последовательность наборов значений входных сигналов заданной длины l . Для каждого входного сигнала x_i подсчитывается число k_i^1 наборов тестовой последовательности, в которых он имеет единичное значение. Если $k_i^1/l < p(x_i)$, то случайным образом выбирается $\lfloor p(x_i)l - k_i^1 \rfloor$ (или $\lceil p(x_i)l - k_i^1 \rceil$) тестовых наборов, в которых i -я компонента имеет значение 0, и значение этой компоненты в выбранных наборах изменяется на 1. Выбранным случайным образом нулевым компонентам i -й строки присваивается значение 1. Аналогично для наборов, для которых имеет место $k_i^1/l > p(x_i)$, выбирается $\lfloor k_i^1 - p(x_i)l \rfloor$ (или $\lceil k_i^1 - p(x_i)l \rceil$) тестовых наборов, в которых i -я компонента имеет значение 1, и значение этой компоненты в выбранных наборах изменяется на 0.

5. Оценка среднего значения рассеивания мощности на основе вычисления вероятностных характеристик сигналов. Основной подход к вычислению оценки рассеивания мощности, как уже говорилось выше, основан на моделировании поведения схемы на заданной тестовой последовательности. Как правило, в случае последовательностных схем генерируется псевдослучайная тестовая последовательность входных сигналов, а в качестве начальных состояний

элементов памяти принимаются нулевые (это состояние, как правило, достижимо, если возможна инициализация состояний элементов памяти путем аппаратного сброса). Для того чтобы получить статистически значимую оценку рассеивания мощности при таких условиях, необходимо моделировать схему на достаточно большом числе тестовых воздействий, близком к $2^k 2^n$, где k – число элементов памяти, n – число входных полюсов схемы. В силу этого для последовательностных схем оправдано использование статических методов, в основе которых лежит вероятностный подход к определению переключаательной активности сигналов. Методы основаны на вероятностных характеристиках входных сигналов и функционально-структурных свойствах исследуемой схемы, что позволяет задавать возможные последовательности входных воздействий опосредованно.

В литературе предлагаются разные вероятностные методы оценки переключаательной активности логических схем [25]). Для вариантов оптимизации схемы на логическом уровне достаточно использовать простые оценки, выведенные в предположении временной и пространственной независимости сигналов на входах элементов схемы и основанные на следующей формуле подсчета переключаательной активности полюса z_i схемы:

$$E(z_i) = 2 p_i (1 - p_i), \quad (6)$$

где p_i – сигнальная вероятность, определяемая средней долей тактов, на которых сигнал на полюсе z_i имеет значение 1. Сигнальные вероятности выходных сигналов простых элементов, типа инвертора, НЕ, И и ИЛИ с $n(e)$ входными полюсами могут быть подсчитаны по формулам

$$p_e^{\neg} = 1 - p_1; \quad p_e^{\wedge} = \prod_{i=1}^{n(e)} p_i; \quad p_e^{\vee} = 1 - \prod_{i=1}^{n(e)} (1 - p_i). \quad (7)$$

Если заданы сигнальные вероятности входных сигналов схемы, то они могут быть распространены на выходы элементов схемы и через всю схему на ее выходные полюсы (по формуле (7)), а затем подсчитаны переключаательные активности всех полюсов схемы (по формуле (6)) и переключаательная активность схемы в целом (в виде их суммы).

Немногочисленные известные методы вычисления вероятностей переключения значений сигналов элементов памяти основаны на использовании автоматной модели схемы с памятью – конечного автомата. При этом реализующее конечный автомат устройство рассматривается как комбинация двух взаимодействующих блоков: комбинационной схемы, реализующей некоторую систему булевых функций, – выходных и возбуждения элементов памяти, и блока элементов памяти – триггеров, на которых фиксируется очередное состояние устройства. Число состояний последовательностной схемы, содержащей k элементов памяти, равно 2^k .

Переключаательная активность элементов памяти измеряется средним числом триггеров, изменяющих свое состояние за один такт (при одном переходе). Эта характеристика зависит от кодирования состояний автомата и от вероятностей нахождения схемы в заданных состояниях. Вероятности нахождения схемы в каждом из этих состояний (далее – вероятности состояний) неодинаковы. Для оценки переключаательной активности КМОП-схем с памятью на основе вероятностного подхода необходимо задание вероятностей переключения значений сигналов не только на входных полюсах схемы (как для случая комбинационных схем), но и вероятностей переключения значений сигналов на выходных полюсах элементов памяти, которые можно определить, зная вероятности состояний.

В работе [26] предложен метод вычисления вероятностей состояний схемы, который основан на использовании уравнений Чепмена – Колмогорова для однородных марковских цепей. Этот подход, взятый за основу предлагаемого ниже метода вычисления сигнальных вероятностей линий обратной связи, применим для функционального задания схемы конечным автоматом и основан на решении системы линейных уравнений.

6. Оценка среднего значения рассеивания мощности на основе вычисления вероятностных характеристик сигналов. Случай 3. Рассмотрим случай, когда для последовательностной схемы заданы вероятностные характеристики входных сигналов (сигнальные вероятности $p(x_i)$) и известна исходная спецификация на проектирование схемы – автоматное описание последовательностной схемы.

Предполагается, что задан автомат с абстрактным внутренним состоянием, который описывается одной многозначной внутренней переменной $s = (s_1, s_2, \dots, s_k)$, а также входными $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ и выходными $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ булевыми переменными.

Автомат задан множеством переходов между его состояниями s_i , условия переходов представлены булевыми функциями от входных переменных (в таблице приведено описание поведения автомата, заимствованного из [27]). Заданы также сигнальные вероятности $p(x_i)$ входных переменных x_i автомата, требуется вычислить вероятности $p(s_i)$ нахождения автомата в каждом из его состояний s_i .

Текущее состояние s_i	Условие перехода f_{ij}	Следующее состояние s_j	Условная вероятность $p(f_{ij})$
1	2	3	4
s_1	$x_1 \vee x_2 x_3$ $\overline{x_1}(\overline{x_2} \vee \overline{x_3})$	s_2 s_5	5/8 3/8
s_2	x_2 $\overline{x_2}$	s_1 s_6	1/2 1/2
s_3	$\overline{x_3} \vee \overline{x_1} x_2$ $x_1 x_3$ $\overline{x_1} \overline{x_2} x_3$	s_1 s_4 s_6	5/8 1/4 1/8
s_4	$x_1 x_2 x_3$ $\overline{x_2} x_3$ $x_3 \vee \overline{x_1} x_2$	s_2 s_3 s_5	1/8 1/4 5/8
s_5	$\overline{x_1}$ x_1	s_3 s_5	1/2 1/2
s_6	$x_1 x_2 x_3$ $\overline{x_1} \vee \overline{x_2} \vee \overline{x_3}$	s_1 s_4	1/8 7/8

Предполагается, что автомат функционирует достаточно долго, каждый его активный переход срабатывает достаточно большое количество раз и что граф переходов автомата сильно связный, т. е. для любой пары состояний всегда найдется последовательность наборов значений входных сигналов, переводящих автомат из одного состояния в другое. При этих условиях граф переходов автомата удовлетворяет условиям марковских цепей и для вычисления вероятностей состояний автомата можно использовать уравнения Чепмена – Колмогорова.

Переход из состояния s_i в состояние s_j происходит тогда, когда функция $f_{ij}(\mathbf{x})$, представляющая условие для данного перехода, принимает значение 1. Вероятность такого перехода равна вероятности того, что функция f_{ij} примет значение 1. Эта вероятность называется условной вероятностью перехода из s_i в s_j и обозначается далее как $p(f_{ij})$. По таким вероятностям вычисляются абсолютные вероятности p_{ij} этих переходов:

$$p_{ij} = p(s_i) p(f_{ij}), \quad (8)$$

которые зависят от установившейся вероятности $p(s_i)$ нахождения автомата в состоянии s_i , откуда происходит переход, и от условной вероятности перехода $p(f_{ij})$.

Функция f_{ij} представляется в виде дизъюнктивной нормальной формы на множестве входных переменных, и ее условная вероятность $p(f_{ij})$ рассчитывается согласно (7). В четвертом столбце таблицы приведены значения $p(f_{ij})$ при $p(x_1) = p(x_2) = p(x_3) = 1/2$. Таким образом, в (8) заранее известны значения $p(f_{ij})$. Можно заметить, что сумма условных вероятностей переходов из каждого состояния s_i автомата равна единице, как и сумма вероятностей всех состояний:

$$\sum_j p(f_{ij}) = 1; \quad \sum_{i=1}^k p(s_i) = 1.$$

Вероятность нахождения автомата в некотором состоянии s_j зависит от вероятностей переходов в это состояние:

$$p(s_j) = \sum_{i=1}^k p_{ij} = \sum_{i=1}^k p(s_i) p(f_{ij}). \quad (9)$$

Очевидно, что (9) задает для рассматриваемого примера следующую систему линейных уравнений, связывающих искомые вероятности $p(s_i)$:

$$\begin{aligned} p(s_1) &= 1/2 p(s_2) + 5/8 p(s_3) + 1/8 p(s_6); \\ p(s_2) &= 5/8 p(s_1) + 1/8 p(s_4); \\ p(s_3) &= 1/4 p(s_4) + 1/4 p(s_5); \\ p(s_4) &= 1/4 p(s_3) + 7/8 p(s_6); \\ p(s_5) &= 3/8 p(s_1) + 5/8 p(s_4) + 1/2 p(s_5); \\ p(s_6) &= 1/2 p(s_2) + 1/8 p(s_3). \end{aligned} \quad (10)$$

Систему (10) можно решить методом Гаусса (или Крамера), основанным на приведении ее к виду с нулевой правой частью и целочисленными коэффициентами. В нашем случае получаются следующие значения вероятностей состояний автомата:

$$\begin{aligned} p(s_1) &= 0,1878, p(s_2) = 0,1326, p(s_3) = 0,1768, \\ p(s_4) &= 0,1215, p(s_5) = 0,2928, p(s_6) = 0,0884. \end{aligned} \quad (11)$$

7. Вычисление сигнальных вероятностей линий обратной связи блока памяти с комбинационной схемой. Для вычисления переключательной активности схемы с памятью необходимо знать не только сигнальные вероятности входных сигналов, но и сигнальные вероятности линий обратной связи блока триггеров, описываемых внутренними переменными z_i . Их значения существенно зависят от кодирования состояний автомата и их вероятностей $p(s_i)$.

Для каждой внутренней переменной z_p находятся все состояния s_i , в коде которых p -я компонента равна 1 (и 0). Сигнальная вероятность $p(z_p)$ (и $p(\bar{z}_p)$) равна сумме вероятностей выделенных состояний:

$$p(z_p) = \sum_{\text{код}_p(s_i)=1} p(s_i); \quad p(\bar{z}_p) = \sum_{\text{код}_p(s_i)=0} p(s_i). \quad (12)$$

Если коды состояний рассматриваемого выше автомата имеют значения: s_1 : 000, s_2 : 001, s_3 : 010, s_4 : 011, s_5 : 111, s_6 : 110, то, воспользовавшись формулой (12), можно получить следующие значения сигнальных вероятностей трех выходных полюсов блока памяти:

$$\begin{aligned} p(z_1) &= p(s_5) + p(s_6) = 0,3812; & p(\bar{z}_1) &= p(s_1) + p(s_2) + p(s_3) + p(s_4) = 0,6187; \\ p(z_2) &= p(s_3) + p(s_4) + p(s_5) + p(s_6) = 0,6795; & p(\bar{z}_2) &= p(s_1) + p(s_2) = 0,3204; \\ p(z_3) &= p(s_2) + p(s_4) + p(s_5) = 0,5469; & p(\bar{z}_3) &= p(s_1) + p(s_3) + p(s_6) = 0,4520. \end{aligned}$$

Следует заметить, что для вероятностей всех внутренних переменных должно выполняться (с учетом округления результатов при поиске корней системы (12)) условие: $p(z_p) + p(\bar{z}_p) = 1$. В то же время, произведя обратные вычисления вероятности состояний через вероятности кодирующих их переменных z_p , можно получить значения, которые не совпадут с подсчитанными значениями их вероятностей (см. (11)). Например, для состояния s_2 , закодированного кодом 001, имеем: $p^*(s_2) = p(\bar{z}_1) p(\bar{z}_2) p(z_3) = 0,1084$, в то время как $p(s_2) = 0,1326$. Разница обусловлена тем, что значения кодирующих переменных коррелируют. Однако для больших схем эта разница стано-

вится несущественной. После вычисления сигнальных вероятностей линий обратной связи переключательная активность комбинационного блока схемы с памятью вычисляется с использованием формул (6) и (7).

Заключение. Предложены подходы к оценке среднего значения потребляемой мощности для случая последовательностных схем при разных исходных данных. Рассмотрены случаи, когда для схемы с памятью задано и не задано автоматное описание; известны или не известны вероятностные характеристики входных сигналов.

Список использованной литературы

1. Рабаи, Ж. М. Цифровые интегральные схемы. Методология проектирования / Ж. М. Рабаи, А. Чандракасан, Б. Николич. – М.: Вильямс, 2007.
2. Уэйкерли, Дж. Проектирование цифровых устройств / Дж. Уэйкерли. – М.: Постмаркет, 2002. – Т. 1.
3. Benini, L. Logic Synthesis for Low Power / L. Benini, G. De Micheli; eds. S. Hassoun, T. Sasao, R.K. Brayton // Logic Synthesis and Verification. – Boston; Dordrecht; London: Kluwer Academic Publishers, 2002. – P. 197–224.
4. Pedram, M. Power Minimization in IC Design: Principles and Applications / M. Pedram // ACM Transactions Design Automation Electronic Systems. – 1996. – Vol. 1. – P. 3–56.
5. Roy, K. Low Power CMOS VLSI Circuit Design / K. Roy, S.C. Prasad. – N. Y.: John Wiley and Sons Inc., 2000.
6. Estimation of average switching activity in combinational and sequential circuits / A. Ghosh [et al.] // 29th ACM / IEEE Design Automation Conference, Tech. Dig., June 1992. – P. 253–259.
7. Monte Carlo approach for power estimation / R. Burch [et al.] // IEEE Transactions on VLSI Systems. – No 1 (1). – 1993. – P. 63–71.
8. Techniques for fast circuit simulation applied to power estimation of CMOS circuits / P. Buch [et al.] // Proc. of the Int. Symp. on Low Power Design. Dana Point, CA, 1995, April 23–26. – P. 135–138.
9. Najm, F. N. A survey of Power Estimation Techniques in VLSI Circuits / F. N. Najm // IEEE Trans. on VLSI. – 1994. – No 12. – P. 446–455.
10. Benini, L. Analysis of hazard contribution to power dissipation in CMOS IC's / L. Benini, M. Favalli, B. Risco // Proc. of the 1994 Int. Workshop on Low Power Design, April 1994. – P. 27–32.
11. Черемисинова, Л. Д. Оценка энергопотребления КМОП-схем на логическом уровне / Л. Д. Черемисинова // Информ. технологии. – 2010. – № 8. – С. 27–35.
12. Najm, F. Probabilistic simulation for reliability analysis of CMOS VLSI circuits / F. Najm [et al.] // IEEE Trans. on Computer-Aided Design. – 1990. – Vol. 9. – No 4. – P. 439–450.
13. Rene, D. Random testing of digital circuits. Theory and application / D. Rene. – Marcel Dekker, Inc. 1998.
14. Bushnell, M. L. Essentials of electronic testing for digital, memory and mixed-signal VLSI circuits / M. L. Bushnell, V. D. Agrawal. – Kluwer Academic Publishers, 2002.
15. Черемисинова, Л. Д. Поиск кратчайшей установочной последовательности схемы с памятью на D-триггерах / Л. Д. Черемисинова // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2015. – № 3. – С. 119–128.
16. Бибило, П. Н. Оценка энергопотребления логических КМОП-схем по их переключательной активности / П. Н. Бибило, Н. А. Кириенко // Микроэлектроника. – 2011. – Т. 40, № 6. – С. 1–14.
17. Закревский, А. Д. Минимизация перебора ориентированных пар / А. Д. Закревский // Танаевские чтения: докл. Четвертой Междунар. науч. конф., Минск, 29 – 30 марта 2010 г. – Минск, 2010. – С. 58–62.
18. Соболев, И. М. Равномерно распределенные 1 последовательности с дополнительным свойством равномерности / И. М. Соболев // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1976. – № 16. – С. 1332–1337.
19. Niederreiter, H. Random number generation and quasi-Monte Carlo methods / H. Niederreiter // Society for industrial and applied mathematics. – 1992.
20. Антонов, И. А. Экономичный способ вычисления ЛПТ-последовательностей / И. А. Антонов, А. М. Салеев // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1979. – № 19. – С. 243–245.
21. Joe, S. Constructing Sobol sequences with better two-dimensional projections / S. Joe, F. Y. Kuo // SIAM J. Sci. Comput. – 2008. – Vol. 30. – P. 2635–2654.
22. Bultena, B. Transition Restricted Gray Codes / B. Bultena, F. Ruskey // The Electronic Journal of Combinatorics. – 1995 – No. 16.
23. Joe, S. Remark on Algorithm 659: Implementing Sobol's quasirandom sequence generator / S. Joe // ACM Trans. Math. Softw. – 2003. – Vol. 29. – P. 49–57.
24. Broda [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.broda.co.uk>. – Дата доступа 10.04.2015.
25. Черемисинова, Л. Д. Оценка энергопотребления КМОП-схем на логическом уровне / Л. Д. Черемисинова // Информ. технологии. – 2010. – № 8. – С. 27–35.
26. Power Estimation Methods for Sequential Logic Circuits / C.-Y. Tsui [et al.] // IEEE Trans. on Very Large Scale Integration Systems). – 1995. – Vol. 3, no. 3.
27. Закревский, А. Д. Алгоритмы энергосберегающего кодирования состояний автомата / А. Д. Закревский // Информатика. – 2011. – № 1.

Поступила в редакцию 04.05.2016

УДК 004.021

Р. С. СЕРГЕЕВ¹, И. С. КОВАЛЕВ^{1,2}

ПОИСК МУТАЦИЙ В ГЕНОМНЫХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЯХ *M. TUBERCULOSIS*, СВЯЗАННЫХ С ЛЕКАРСТВЕННОЙ УСТОЙЧИВОСТЬЮ

¹Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь, e-mail: roma.sergeev@gmail.com

²EPAM Systems, Минск, Беларусь, e-mail: ivanich3d@gmail.com

В настоящей работе исследуются методы полногеномного поиска ассоциаций. Представлена методология, позволяющая осуществлять поиск геномных маркеров лекарственной устойчивости к противомикробным препаратам. Приводятся результаты экспериментов по поиску мутаций резистентности к основным противотуберкулезным препаратам на основании данных о пациентах из Беларуси.

Ключевые слова: полногеномный поиск ассоциаций, биоинформатика, лекарственная устойчивость, регрессия, регуляризация, стохастический поиск, статистическая проверка гипотез.

R. S. SERGEEV¹, I. S. KAVALIYOU^{1,2}

SEARCH FOR DRUG-RESISTANCE MUTATIONS IN *M. TUBERCULOSIS* GENOME SEQUENCES

¹United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus, e-mail: roma.sergeev@gmail.com

²EPAM Systems, Minsk, Belarus, e-mail: ivanich3d@gmail.com

We investigate algorithms for genome-wide association studies. A methodology is proposed that allows searching for drug-resistance mutations in mycobacterium tuberculosis whole genomes. We present the experimental results on identification of resistance mutations to major anti-TB agents using patients' data from Belarus.

Keywords: genome-wide association, bioinformatics, drug resistance, regression, regularization, stochastic search, statistical hypothesis testing.

Введение. Появление штаммов микроорганизмов, устойчивых к лекарственным препаратам, представляет собой серьезную угрозу здравоохранению. Молекулярные основы резистентности, как правило, связаны с мутационными изменениями в геномах микроорганизмов, возникающими в ходе естественного отбора или под воздействием применяемых препаратов при ненадлежащем лечении. Целью настоящего исследования послужила разработка методологии к анализу мутаций в последовательностях ДНК микобактерий туберкулеза и определение геномных маркеров лекарственной устойчивости, что может иметь большое значение для своевременной диагностики форм туберкулеза и понимания биологических механизмов становления резистентности.

Методика эксперимента. Для выполнения исследования была сформирована выборка из 136 образцов *M. tuberculosis*, включающая 17,7 % штаммов микобактерий туберкулеза, чувствительных ко всем противотуберкулезным препаратам, 2,9 % монорезистентных штаммов и 79,4 % штаммов с множественной лекарственной устойчивостью (МЛУ), среди которых 59,7 % обладали широкой лекарственной устойчивостью (ШЛУ). Все образцы *M. tuberculosis* были получены из клинических проб и секвенированы на платформе Illumina HiSeq2000 с длиной прочтений в 101 пару оснований при среднем покрытии 140×. В ходе сборки геномов короткие

прочтения выравнивались на референсный штамм H37Rv, после чего было выполнено выделение и аннотирование геномных вариаций.

Методология анализа данных. Основываясь на результатах лабораторных тестов, из прочитанных геномов *M. tuberculosis* были сформированы наборы данных для поиска статистически значимых различий между устойчивыми и чувствительными к лекарственным средствам образцами. Процедура анализа данных состояла из нескольких этапов. Первоначально выполнялся сравнительный анализ геномов и исследовалась популяционная структура образцов. Последующие шаги были направлены на изучение зависимостей между геномными полиморфизмами и результатами фенотипических тестов на резистентность. Для этого применялись методы полногеномного поиска ассоциаций, основанные на одно- и многомаркерном анализе зависимостей.

Большинство методов одномаркерного анализа выполняют оценку таблиц сопряженности, в которых приводится информация о частотах основного и альтернативного аллелей в некоторой позиции генома среди устойчивых и чувствительных образцов. Недостатком такого подхода является то, что он исходит из предположения о независимости мутаций друг от друга, что в действительности часто не выполняется. В настоящем исследовании применялся статистический тест Кохрана – Мантеля – Хензеля (Cochran – Mantel – Haenszel, CMH) [1] и χ^2 -критерий Пирсона с поправкой Eigenstrat [2], рассчитанной с помощью метода главных компонент. Эти тесты позволяют учесть эффект скрытой переменной, вызванный сегрегацией штаммов по принципу принадлежности к генетически более однородным группам, который называется в популяционной генетике «эффект основателя». Группы выделялись с помощью метода главных компонент, принадлежность входящих штаммов к известным генетическим семействам устанавливалась путем сполиготипирования. При выполнении процедуры множественной проверки статистических гипотез применялась поправка Бенджамини – Хохберга для коррекции p -значений.

Более сложные методы анализа зависимостей позволяют явно моделировать совместное влияние геномных маркеров на изменение фенотипа. В настоящей работе использовались регуляризованная логистическая регрессия [3], линейная смешанная модель (linear mixed model LMM) [4, 5] и ориентированный на моду стохастический поиск (mode oriented stochastic search, MOSS) [6]. Приведем краткое описание этих методов.

Предположим, что выборка состоит из n организмов и представлена в виде матрицы генотипов X размера $n \times m$, где m – число исследуемых мутаций. Пусть переменная $y_i \in \{0,1\}$ задает значение фенотипа i -го организма (чувствительный/устойчивый), а \mathbf{x}_i – его генотип (строка матрицы X , кодирующая набор исследуемых геномных маркеров). Тогда апостериорная вероятность наблюдения лекарственно-устойчивого фенотипа в классической модели логистической регрессии задается выражением $P(y_i = 1 | \mathbf{x}_i) = 1 / (1 + \exp(-\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{x}_i))$, где $\boldsymbol{\beta}$ – вектор параметров, определяющих значимость мутаций для развития лекарственной устойчивости. Однако применение логистической регрессии на всех имеющихся полиморфизмах в таком виде сопряжено с рядом трудностей, поскольку число параметров (мутаций) значительно превосходит количество доступных для их оценки наблюдений (секвенированных образцов). С другой стороны, исходя из биологической интерпретации ожидаемого результата, можно предположить, что число значимых маркеров лекарственной устойчивости будет невелико, следовательно, подходящим является разреженное решение. Одним из способов получить такое решение является применение методов регуляризации. Наилучшим способом регуляризации модели логистической регрессии в проведенных экспериментах стало использование метода эластичной сети (elastic net), при котором для поиска оценок вектора параметров минимизировался функционал $\sum_{i=1}^n l(\mathbf{x}_i, y_i, \boldsymbol{\beta}) + \lambda_1 \|\boldsymbol{\beta}\|_{l_1} + \lambda_2 \|\boldsymbol{\beta}\|_{l_2} \rightarrow \min_{\boldsymbol{\beta}}$, где через $l(\mathbf{x}_i, y_i, \boldsymbol{\beta})$ обозначена функция потерь при классификации i -го организма. Чтобы еще больше сократить число оцениваемых параметров, прогон логистической регрессии был выполнен повторно на множестве геномных маркеров, коэффициенты при которых были признаны статистически значимыми по итогам первого прогона.

В отличие от приведенной выше схемы логистической регрессии, линейная смешанная модель позволяет учесть скрытые взаимосвязи за счет включения в нее вектора случайных эффектов, рассчитанных по матрице родства микроорганизмов. Линейная смешанная модель может быть представлена выражением вида $\mathbf{y} = X\boldsymbol{\beta} + \mathbf{u} + \boldsymbol{\varepsilon}$, где \mathbf{y} – вектор фенотипов, X – матрица генотипов, $\boldsymbol{\beta}$ – вектор параметров. $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N_n(0, \sigma_\varepsilon^2 I)$ – вектор случайных ошибок, σ_ε^2 – дисперсия случайной ошибки, $\mathbf{u} \sim N_n(0, \sigma_u^2 K)$ – вектор случайных эффектов, σ_u^2 – дисперсия случайного эффекта и K – матрица родства организмов (kinship matrix), одним из способов задания которой является оценка $K = XX^T/m$.

Для исследования значимости коэффициентов регрессии в приведенных моделях применялся тест отношения правдоподобия. При этом тестировалась нулевая гипотеза $H_0: \beta_j = 0$ против альтернативы $H_1: \beta_j \neq 0$ для всех мутаций $j = \overline{1, m}$. Вычисление оценок параметров β_j , σ_ε^2 и σ_u^2 для линейной смешанной модели выполнялось по методу максимального правдоподобия. В случае регуляризованной логистической регрессии для оценки значений $\boldsymbol{\beta}$ и выбора коэффициентов λ_1 и λ_2 применялся алгоритм LARS-EN [3].

Хорошим переборным методом поиска наиболее вероятных моделей регрессии и идентификации значимых полиморфизмов послужил алгоритм ориентированного на моду стохастического поиска на множестве иерархических лог-линейных моделей с числом переменных от двух до пяти [6]. С его помощью удалось проанализировать не только влияние отдельных геномных маркеров, но и их взаимодействие. Согласно алгоритму, для проведения стохастического поиска вводится множество M мощности $|M| = l$, состоящее из рассматриваемых иерархических лог-линейных моделей. Пусть $A_{(k)} \subset \{1, 2, \dots, m\}$, $k = \overline{1, l}$ – некоторое подмножество геномных маркеров, $X_{A_{(k)}}$ – соответствующие им столбцы матрицы генотипов, \mathbf{y} – вектор фенотипов, кодирующий результаты тестов на чувствительность к анализируемому препарату. Все модели из множества M можно записать в виде $\mu_k = \{p(X_{A_{(k)}} \cdot \mathbf{y} | \boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta} \in \Theta_k\}$, $k = \overline{1, l}$, где $\boldsymbol{\theta}$ – вектор параметров и $p(X_{A_{(k)}} \cdot \mathbf{y} | \boldsymbol{\theta})$ – плотность распределения вероятностей. Зададим также априорные вероятности $P(\mu_k)$ моделей $\mu_k \in M$ и их параметров $p(\boldsymbol{\theta}), \boldsymbol{\theta} \in \Theta_k$. Каждой рассматриваемой иерархической лог-линейной модели ставится в соответствие модель регрессии. Например, для подмножества независимых переменных с индексами из $A = \{i_1, i_2\}$ модель регрессии, порожденная соответствующей иерархической лог-линейной моделью, может быть представлена в виде $\ln \frac{P(y_i = 1 | X_A)}{P(y_i = 0 | X_A)} = \theta(\mathbf{y}) + \theta_{i_1}(\mathbf{y}, \mathbf{x}_{i_1}) + \theta_{i_2}(\mathbf{y}, \mathbf{x}_{i_2}) + \theta_{i_1 i_2}(\mathbf{y}, \mathbf{x}_{i_1}, \mathbf{x}_{i_2})$. Предположим, что имеется алгоритм, с помощью которого можно эффективно вычислять апостериорные вероятности

$P(\mu_k | X, \mathbf{y}) = P(X, \mathbf{y} | \mu_k)P(\mu_k) / \sum_{t=1}^l P(X, \mathbf{y} | \mu_t)P(\mu_t)$ моделей $\mu_k \in M$ при наличии данных. Будем считать, что априорные вероятности моделей одинаковы, поэтому апостериорная вероятность каждой модели пропорциональна ее маргинальному правдоподобию. В работе [6] показано, что для любого непустого $A \subset \{1, 2, \dots, m\}$ параметры регрессии $y \sim X_A$ и ее маргинальное правдоподобие можно выразить через параметры и маргинальные правдоподобия насыщенных лог-линейных моделей, построенных по множествам переменных $X_A \cup \mathbf{y}$ и X_A .

Для каждого элемента множества M введем функцию, возвращающую его окружение, такую что, если μ_k и μ_t – две модели из множества M , соединенные путем $\mu_k = \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_s = \mu_t$, то μ_i является соседней для модели μ_{i-1} для $i = \overline{2, s}$. В случае иерархических лог-линейных моделей переход от текущего элемента к соседнему может осуществляться одним из следующих способов: включением в модель наименьшего терма, содержащего новый набор взаимодействующих переменных, либо исключением из модели самого длинного терма с выбранными взаимодействующими переменными. Процедура перебора организована таким образом, чтобы при переходах между моделями основное внимание уделять моделям, имеющим наибольшие апостериорные вероятности [6]. В результате своей работы алгоритм формирует множество наиболее подходящих моделей $M(c) = \left\{ \mu \in M : P(\mu | X, \mathbf{y}) \geq c \cdot \max_{\mu' \in M} P(\mu' | X, \mathbf{y}) \right\}$, где $P(\mu | X, \mathbf{y})$ – апостериорная

вероятность модели $\mu \in M$, а $c \in (0,1)$ – параметр, влияющий на число вариантов для перебора и размер результирующего множества решений.

Рассмотрим все модели $\mu_k \in M(c)$, $k \in B$, где B – множество индексов моделей, вошедших в результирующее множество решений. С помощью процедуры байесовского усреднения по найденным лог-линейным моделям и соответствующим им регрессиям строится классификатор для предсказания результатов теста на лекарственную устойчивость: $P(y | X, \mathbf{y}) = \sum_{k \in B} P(y | \mu_k, X, \mathbf{y}) P(\mu_k | X, \mathbf{y})$, где $P(y | X, \mathbf{y})$ соответствует регрессии $y \sim X$, $P(y | \mu_k, X, \mathbf{y})$ – регрессиям $y \sim X_{A(k)}$ и $P(\mu_k | X, \mathbf{y})$ – апостериорная вероятность модели μ_k . Коэффициенты результирующей регрессии $y \sim X$ оцениваются по выборке из совместного апостериорного распределения вероятностей для коэффициентов регрессий, соответствующих моделям μ_k , $k \in B$. Значимость каждого отдельного геномного маркера $j \in \bigcup_{k \in B} A(k)$ может быть определена как сумма апостериорных вероятностей моделей из множества $M(c)$, в которые входит этот маркер.

Таким образом, в отличие от обычного регрессионного подхода к оценке значимости индивидуальных мутаций, процедура на основе алгоритма MOSS позволяет ранжировать и сравнивать модели в соответствии с их апостериорными вероятностями и использовать байесовское усреднение, чтобы оценить значимость отдельных полиморфизмов по нескольким моделям, которые наилучшим образом согласуются с данными.

Результаты и их обсуждение. По итогам анализа популяционной структуры исследуемые образцы были разделены на несколько групп. С помощью сполитотипирования удалось установить генетические семейства наиболее представленных штаммов *M. tuberculosis*: Beijing (63,6 %), T1 (18,9 %), H3 (5,6 %) и T5 (2,8 %).

Корреляционный анализ результатов тестов на чувствительность к противотуберкулезным препаратам позволил проанализировать перекрестную устойчивость между лекарствами (табл. 1).

Таблица 1. Парные корреляции между результатами лабораторных тестов на чувствительность к противотуберкулезным препаратам

Препарат	EMB	INH	RIF	PZA	STM	CYCL	ETH	PARA	AMIK	CAPR	OFLO
EMB	1,00	0,90	0,90	1,00	0,80	0,36	0,34	0,25	0,53	0,59	0,55
INH	0,90	1,00	1,00	0,91	0,89	0,36	0,31	0,23	0,48	0,52	0,53
RIF	0,90	1,00	1,00	0,91	0,89	0,37	0,31	0,22	0,48	0,53	0,53
PZA	1,00	0,91	0,91	1,00	0,72	0,38	0,38	0,18	0,38	0,46	0,49
STM	0,80	0,89	0,89	0,72	1,00	0,33	0,27	0,20	0,42	0,45	0,47
CYCL	0,36	0,36	0,37	0,38	0,33	1,00	0,33	0,32	0,27	0,35	0,23
ETH	0,34	0,31	0,31	0,38	0,27	0,33	1,00	0,06	0,33	0,46	0,14
PARA	0,25	0,23	0,22	0,18	0,20	0,32	0,06	1,00	0,07	0,13	0,23
AMIK	0,53	0,48	0,48	0,38	0,42	0,27	0,33	0,07	1,00	0,90	0,57
CAPR	0,59	0,52	0,53	0,46	0,45	0,35	0,46	0,13	0,90	1,00	0,61
OFLO	0,55	0,53	0,53	0,49	0,47	0,23	0,14	0,23	0,57	0,61	1,00

Интерес представляет исследование дисперсий предсказаний, полученных с помощью линейной смешанной модели, и выделение в них составляющей, обусловленной геномными вариациями (proportion of phenotypic variance explained, PVE). Рассматриваемую величину можно охарактеризовать соотношением $k_{SNP} = \sigma_g^2 / (\sigma_g^2 + \sigma_e^2)$, где σ_g^2 – изменчивость, объясняемая вариациями в геноме, σ_e^2 – изменчивость, объясняемая факторами внешней среды. Эта информация (табл. 2) дает представление о том, насколько достоверно лекарственная устойчивость может быть предсказана по вариациям в имеющихся геномах.

Таблица 2. Доля дисперсии фенотипа (чувствительный / устойчивый), объясненная изменениями в геноме

Препараты первого ряда	PVE, %	Стандартная ошибка, %	Препараты второго ряда	PVE, %	Стандартная ошибка, %
INH (изониазид)	99,997	0,021	CYCL (циклосерин)	75,716	12,386
RIF (рифампицин)	99,997	0,021	CAPR (капреомицин)	73,903	11,048
PZA (пиразинамид)	99,997	0,049	AMIK (амикацин)	69,831	11,925
STM (стрептомицин)	99,997	0,036	OFLO (офлоксацин)	58,682	12,922
EMB (этамбутол)	97,119	1,695	ETH (этионамид)	45,680	24,906
			PARA (кислота парааминосалициловая)	29,998	17,010

Основываясь на приведенных данных можно заключить, что одни лишь геномные полиморфизмы не могут полностью объяснить наблюдаемую лекарственную устойчивость к большинству препаратов второго ряда, что следует учитывать при интерпретации результатов полногеномного анализа ассоциаций.

Для поиска мутаций, связанных с лекарственной устойчивостью, на этапе предобработки данных была выполнена фильтрация геномных вариаций по качеству их детектирования. Также из рассмотрения исключались протяженные вставки/удаления и мутации, присутствующие менее чем в 1 % образцов и повторяющиеся столбцы матрицы генотипов. Приведем обзор качества предсказаний, полученных с помощью рассмотренных методов анализа ассоциаций на предобработанных наборах данных, содержащих 765 полиморфизмов и число штаммов от 34 до 132 (табл. 3). Для оценки обобщающей способности моделей использовался метод перекрестной проверки и вычислялись метрики, общепринятые для оценки качества классификации: точность – доля истинно устойчивых образцов относительно всех объектов, которые классификатор отнес к классу лекарственно-устойчивых; полнота – доля найденных классификатором лекарственно-устойчивых образцов относительно всех истинно устойчивых образцов в выборке; *F*-мера – среднее гармоническое между точностью и полнотой; правильность – доля объектов, по которым классификатор принял правильное решение.

Таблица 3. Сравнительный анализ качества предсказаний, полученных с помощью многомаркерного анализа ассоциаций

Препарат	Количество устойчивых образцов	Количество чувствительных образцов	Метод	Точность	Полнота	<i>F</i> -мера	Правильность
OFLO	69	63	MOSS	0,929	0,752	0,831	0,840
			LMM	0,557	1	0,715	0,583
			Логистическая регрессия	0,971	0,986	0,978	0,977
EMB	102	30	MOSS	0,962	0,981	0,972	0,955
			LMM	1	0,108	0,195	0,311
			Логистическая регрессия	0,990	1	0,995	0,992
INH	106	26	MOSS	1	0,981	0,990	0,985
			LMM	1	1	1	1
			Логистическая регрессия	1	1	1	1
PZA	28	6	MOSS	1	1	1	1
			LMM	0,966	1	0,983	0,971
			Логистическая регрессия	1	1	1	1
RIF	106	26	MOSS	1	0,869	0,930	0,895
			LMM	1	1	1	1
			Логистическая регрессия	1	1	1	1
STM	110	22	MOSS	1	0,954	0,977	0,962
			LMM	1	0,991	0,995	0,992
			Логистическая регрессия	1	1	1	1
AMIK	59	63	MOSS	1	0,847	0,917	0,926
			LMM	0,484	1	0,652	0,484
			Логистическая регрессия	1	0,932	0,965	0,967

Препарат	Количество устойчивых образцов	Количество чувствительных образцов	Метод	Точность	Полнота	F-мера	Правильность
CAPR	66	51	MOSS	1	0,731	0,845	0,848
			LMM	0,564	1	0,721	0,564
			Логистическая регрессия	1	1	1	1
CYCL	46	70	MOSS	0,502	0,453	0,477	0,604
			LMM	0,397	1	0,568	0,397
			Логистическая регрессия	1	0,978	0,989	0,991

Следует отметить, что результирующие множества значимых мутаций, получаемых разными методами, отличались по количеству и составу признаков. Наименьшее число значимых признаков при достаточно хороших показателях качества классификации было получено алгоритмом MOSS. Наилучшие результаты по итогам перекрестной проверки показала регуляризованная логистическая регрессия. Однако, несмотря на меры по сокращению числа анализируемых с помощью регрессии признаков (фильтрация данных, несколько итераций запуска алгоритма для отбора значимых признаков), количество значимых коэффициентов оставалось неоправданно большим, что может свидетельствовать о включении шумовых признаков в результирующее множество. Тем не менее сопоставление найденных геномных маркеров лекарственной устойчивости с уже используемыми в современных системах молекулярно-генетической диагностики показало, что все применяемые нами методы (логистическая регрессия, линейная смешанная модель, метод на основе ориентированного на моду стохастического поиска), как правило, приписывали найденным маркерам наибольшую значимость.

Заключение. В настоящей работе предложена методология, позволяющая исследовать взаимосвязь мутаций в геномах микроорганизмов с развитием лекарственной устойчивости к противомикробным препаратам. Описанная методология была использована в проекте CRDF OISE-14-60497-1 для исследования 136 штаммов микобактерий туберкулеза, выделенных у пациентов из Беларуси с различными формами туберкулеза легких.

Список использованной литературы

1. *Agresti, A.* An Introduction to Categorical Data Analysis / A. Agresti. – Hoboken, 2002.
2. Principal components analysis corrects for stratification in genome-wide association studies / A. L. Price [et al.] // *Nat. Genet.* – 2006. – N 38 (8). – P. 904–909.
3. *Zou, H.* Regularization and variable selection via the elastic net / H. Zou, T. Hastie // *J. R. Statist. Soc. B.* – 2005. – N 67 (2). – P. 301–320.
4. *Zhou, X.* Genome-wide efficient mixed-model analysis for association studies / X. Zhou, M. Stephens // *Nature Genetics.* – N 44 (7). – 2012. – P. 821–824.
5. Efficient control of population structure in model organism association mapping / H. M. Kang [et al.] // *Genetics.* – N 178 (3). – 2008. – P. 1709–1723.
6. *Dobra, A.* The mode-oriented stochastic search (MOSS) for log-linear models with conjugate priors / A. Dobra, H. Massam // *Statistical methodology.* – 2010. – N 7. – P. 240–253.

Поступила в редакцию 21.12.2015

КАРОТКІЯ ПАВЕДАМЛЕННІ

УДК 517.948.32:517.544

Э. И. ЗВЕРОВИЧ

ДВА ОБОБЩЕНИЯ ПОЛИГАММА-ФУНКЦИЙ

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь, e-mail: Zverovich@bsu.by

Основное свойство $\psi^{(n)}(z+1) - \psi^{(n)}(z) = \frac{(-1)^n n!}{z^{n+1}}$ производных $\psi^{(n)}(z) = \frac{d^n}{dz^n} \ln \Gamma(z)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ обобщается на случай производных дробного порядка от $\ln \Gamma(z)$. Полученное свойство в свою очередь обобщается до решения уравнения $F(z+1) - F(z) = e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1) \frac{a^z}{z^{\alpha+1}}$, где $\operatorname{Re} \alpha > 0$, $|a| < 1$. Полученный результат применяется для суммирования рядов вида $\sum_{n=0}^{\infty} a^n R(n)$, где $R(n)$ – рациональная функция от индекса суммирования.

Ключевые слова: полигамма-функция, суммирование рядов, интегральная формула Коши, периодический аналог ядра Коши, функции Гурвица.

E. I. ZVEROVICH

TWO GENERALIZATIONS OF POLYGAMMA-FUNCTIONS

Belarusian State University, Minsk, Belarus, e-mail: Zverovich@bsu.by

The basic property $\psi^{(n)}(z+1) - \psi^{(n)}(z) = \frac{(-1)^n n!}{z^{n+1}}$ for the derivatives $\psi^{(n)}(z) = \frac{d^n}{dz^n} \ln \Gamma(z)$, $n = 0, 1, 2, \dots$ is generalized in the case of fractional derivatives of the function $\ln \Gamma(z)$. The property obtained is then generalized to the solution of the equation $F(z+1) - F(z) = e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1) \frac{a^z}{z^{\alpha+1}}$, where $\operatorname{Re} \alpha > 0$, $|a| < 1$. The result obtained is applied to summation of series of the form $\sum_{n=0}^{\infty} a^n R(n)$, where $R(n)$ is the rational function of summation index.

Keywords: polygamma-function, summation of series, Cauchy integral formula, periodic analog of the Cauchy kernel, Hurwitz functions.

1. Полигамма-функциями называются производные различных порядков от функции $\ln \Gamma(z)$. В частности, пси-функция $\psi(z) = \frac{d}{dz} \ln \Gamma(z)$ называется также бигамма-функцией, а ее производные

$$\psi'(z), \psi''(z), \psi'''(z), \psi^{IV}(z), \dots$$

– тригамма-, тетрагамма-, пентагамма-, гексагамма-, ... функциями соответственно [1, с. 84–85]. Они хорошо изучены, табулированы и обладают многими свойствами, среди которых выделим следующее:

$$\psi^{(n)}(z+1) - \psi^{(n)}(z) = \frac{(-1)^n n!}{z^{n+1}}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1)$$

Это свойство считаем основным, так как с его помощью, например, суммы любых сходящихся рядов вида $n = \sum_{n=0}^{\infty} R(n)$, где $R(n)$ – рациональная функция от индекса суммирования n , выражаются в явном виде через полигамма-функции.

Желая обобщить свойство (1), станем искать аналитическую при $\operatorname{Re} z > 0$ функцию $\psi^{(\alpha)}(z)$, удовлетворяющую следующему функциональному уравнению:

$$\psi^{(\alpha)}(z+1) - \psi^{(\alpha)}(z) = \frac{e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1)}{z^{\alpha+1}}, \quad (2)$$

где $\operatorname{Re} \alpha > 0$, причем $\psi^{(\alpha)}(z) \rightarrow 0$ при $\operatorname{Re} z \rightarrow +\infty$. Очевидно, что если $\alpha = 0, 1, 2, \dots$, то (2) переходит в (1).

Чтобы найти функцию $\psi^{(\alpha)}(z)$, зададим параметр $\lambda \in (0, 1)$ и будем считать сначала, что $\lambda < \operatorname{Re} z < \lambda + 1$. Применим к функции $\frac{1}{z^{\alpha+1}}$ интегральную формулу Коши в полосе $\Pi = \Pi^\circ \cup \partial\Pi = \{\lambda \leq \operatorname{Re} z \leq \lambda + 1\}$, используя периодический аналог ядра Коши $\frac{de^{2\pi i \tau}}{e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z}}$. Тогда получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{z^{\alpha+1}} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Pi} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} + \int_{\lambda+i\infty}^{\lambda-j\infty} \right) \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-j\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})}. \end{aligned}$$

Так как подынтегральный дифференциал мероморфен по переменной τ в правой полуплоскости, то последние интегралы можно вычислить с помощью вычетов. Имеем

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-j\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(z+n)^{\alpha+1}} = -\zeta(\alpha+1, z),$$

где $\zeta(\alpha+1, z)$ – обобщенная дзета-функция Римана (функция Гурвица; [2, с. 1087, формула 9.521.1]). Аналогично вычисляется и другой интеграл:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-j\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{(\tau+1)^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \\ &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(z+1+n)^{\alpha+1}} = -\zeta(\alpha+1, z+1). \end{aligned}$$

Образовав разность значений последних двух интегралов, получим

$$-\zeta(\alpha+1, z+1) + \zeta(\alpha+1, z) = \frac{1}{z^{\alpha+1}}.$$

Умножим это равенство на $e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1)$, найдем

$$e^{\pi i (\alpha+1)} \Gamma(\alpha+1) \zeta(\alpha+1, z+1) - e^{\pi i (\alpha+1)} \Gamma(\alpha+1) \zeta(\alpha+1, z) = \frac{e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1)}{z^{\alpha+1}}. \quad (3)$$

Так как правые части равенств (2) и (3) совпадают, то из них находим

$$\psi^{(\alpha)}(z) = e^{\pi i (\alpha+1)} \Gamma(\alpha+1) \zeta(\alpha+1, z) + f(z),$$

где $f(z)$ – некоторая аналитическая функция, периодическая с основным периодом 1. Поскольку $\psi^{(\alpha)}(z) \rightarrow 0$ и $\zeta(\alpha+1, z) \rightarrow 0$ при $\operatorname{Re} z \rightarrow +\infty$, то $f(z) \equiv 0$. Таким образом, окончательно имеем

$$\psi^{(\alpha)}(z) = e^{\pi i(\alpha+1)} \Gamma(\alpha+1) \zeta(\alpha+1, z). \quad (4)$$

Эта формула в доступных нам источниках (напр., [1–3] и др.) не встречалась.

2. Рассмотрим теперь более общее, чем (2), уравнение

$$F(z+1) - F(z) = e^{\pi i \alpha} \Gamma(\alpha+1) \frac{a^z}{z^{\alpha+1}}, \quad (5)$$

где $0 < |a| \leq 1, \operatorname{Re} \alpha > 0$. Решим его с помощью интегральной формулы Коши в полосе $\Pi = \Pi^\circ \cup \partial\Pi = \{\lambda \leq \operatorname{Re} z \leq \lambda+1\}$. При $z \in \Pi^\circ$ имеем:

$$\begin{aligned} \frac{a^z}{z^{\alpha+1}} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\partial\Pi} \frac{a^\tau de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \frac{1}{2\pi i} \left(\int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} + \int_{\lambda-i\infty}^{\lambda+i\infty} \right) \frac{a^\tau de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} \frac{a^\tau de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-i\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})}. \end{aligned}$$

Так как подынтегральный дифференциал мероморфен по переменной τ в правой полуплоскости и стремится к нулю при $\operatorname{Re} \tau \rightarrow +\infty$, то последние интегралы можно вычислить с помощью вычетов. Имеем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-i\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{a^\tau de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{n+z}}{(z+n)^{\alpha+1}} = -a^z \Phi(a, \alpha+1, z), \\ \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda+1-i\infty}^{\lambda+1+i\infty} \frac{a^\tau de^{2\pi i \tau}}{\tau^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} &= \frac{1}{2\pi i} \int_{\lambda-i\infty}^{\lambda+i\infty} \frac{a^{\tau+1} de^{2\pi i \tau}}{(\tau+1)^{\alpha+1} (e^{2\pi i \tau} - e^{2\pi i z})} = \\ &= -\sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^{n+1+z}}{(z+1+n)^{\alpha+1}} = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{a^{n+z}}{(n+z)^{\alpha+1}} = -a^z \Phi(a, \alpha+1, z+1), \end{aligned}$$

где $\Phi(a, \alpha+1, z)$ – обобщение функции Гурвица [2, с. 1089, формула 9.550]. Отсюда находим

$-a^z \Phi(a, \alpha+1, z+1) + \Phi(a, \alpha+1, z) = \frac{a^z}{z^{\alpha+1}}$. Сравнив это равенство с (5), получим

$$F(z) = e^{\pi i(\alpha+1)} \Gamma(\alpha+1) a^z \Phi(a, \alpha+1, z). \quad (6)$$

Таким образом, уравнение (5) решено.

В качестве приложения отметим, что использование функции (6) позволяет вычислять суммы всевозможных сходящихся рядов вида

$$\sum_{n=0}^{\infty} R(n) \cdot a^n, \quad (7)$$

где $0 < |a| < 1$, а $R(n)$ – рациональная функция от индекса суммирования n . Для этого надо сначала разложить рациональную функцию $R(n)$ на сумму простейших рациональных дробей. Затем в соответствии с этим представить ряд (7) в виде суммы рядов такого же типа, где вместо $R(n)$ стоит простейшая рациональная функция. Такие ряды суммируются непосредственно с помощью функции (6), где $\Phi(a, \alpha+1, z)$ – обобщение функции Гурвица.

В качестве примера просуммируем ряд $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(12n+5)a^n}{(2n+1)^2(3n+2)^2}$. Сначала разложим рациональную дробь на простейшие

$$\frac{12n+5}{(2n+1)^2(3n+2)^2} = \frac{1}{\left(n+\frac{1}{2}\right)^2} - \frac{1}{\left(n+\frac{2}{3}\right)^2}.$$

В результате получим

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(12n+5)a^n}{(2n+1)^2(3n+2)^2} = a^{\frac{2}{3}}\Phi\left(a, 2, \frac{2}{3}\right) - a^{\frac{1}{2}}\Phi\left(a, 2, \frac{1}{2}\right),$$

где $\Phi(a, \alpha, z)$ – обобщение функции Гурвица.

Список использованной литературы

1. Справочник по специальным функциям / под ред. М. Абрамовица, И. Стриган. – М.: Наука, 1979.
2. Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – М.: Физматгиз, 1962.
3. Янке, Е. Специальные функции / Е. Янке, Ф. Эмде, Ф. Лёш. – М.: Наука, 1968.

Поступила в редакцию 22.03.2016

ВУЧОНЫЯ БЕЛАРУСІ**ВІКТАР СЯМЁНАВІЧ БУРАКОЎ****(Да 85-годдзя з дня нараджэння)**

25 сакавіка 2016 г. споўнілася 85 гадоў заснавальніку беларускай школы селектыўнай спектраскапіі плазмы і спектральнага аналізу, выдатнаму беларускаму вучонаму і арганізатару навукі, акадэміку Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі, доктару фізіка-матэматычных навук, заслужанаму дзеячу навукі і тэхнікі БССР, лаўрэату Дзяржаўнай прэміі БССР, прафесару Віктару Сямёнавічу Буракову. В. С. Буракоў шырока вядомы ў навуковым свеце як вядучы спецыяліст у галіне лазернай спектраскапіі і фізікі плазмы.

Нарадзіўся Віктар Сямёнавіч на Віцебшчыне ва Ушацкім раёне. Пасля заканчэння Докшыцкай сярэдняй школы ў 1950 г. ён паступіў на фізіка-матэматычны факультэт Беларускага дзяржаўнага ўніверсітэта, скончыўшы які, быў накіраваны на навуковую працу ў Інстытут фізікі Акадэміі навук. На першым этапе сваёй навуковай дзейнасці вучоны займаўся эмісійным спектральным аналізам. Ён унёс вялікі ўклад у распрацоўку метаду і яго ўкараненне на прадпрыемствах Беларусі. Вынікі гэтай працы абагульнены ім у манаграфіі «Практычны дапаможнік па спектральнаму аналізу» (сааўтар – прафесар А. А. Янкоўскі), выдадзенай у Беларусі (1960 г.) і Англіі (1964 г.).

У далейшым навуковыя інтарэсы В. С. Буракова канцэнтруюцца на спектраскапіі плазмы, лазернай фізіцы, навуковым прыборабудаванні. Ім распрацаваны новыя спосабы выкарыстання лазераў у дыягностыцы плазмы: вызначэнні яе тэмпературы, ціску, канцэнтрацыі часцінак і аптычнай шчыльнасці, створана адпаведная апаратура, а таксама даследаваны працэсы ўзаемадзеяння лазернага выпраменьвання з плазмай і інтэрпрэтаваны нелінейна-аптычныя эфекты ў плазме.

Асабліва плённымі сталі работы В. С. Буракова ў галіне селектыўнай лазернай спектраскапіі, якая базіруецца на селектыўным узбуджэнні атамаў і малекул рэзанансным лазерным выпраменьваннем. Ім праведзены комплексны аналіз магчымасцей унутрырэзанатарнай і флуарэсцэнтнай спектраскапіі, распрацаваны спосаб атамізацыі і ўзбуджэння рэчыва, а таксама створана адпаведная апаратура.

Сярод метадаў селектыўнай лазернай спектраскапіі важнае месца належыць лазерна-індуцыраванай флуарэсцэнцыі атамаў і малекул, якая дазваляе атрымліваць дэтальную інфармацыю аб шчыльнасці, тэмпературы і прасторава-часавых размеркаваннях розных кампанентаў плазмы з высокімі адчувальнасцю і прасторава-часавым разрашэннем. Працы Віктара Сямёнавіча і яго вучняў унеслі значны ўклад у распрацоўку гэтага метаду ў дачыненні да дыягностыкі нераўнаважнай нестацыянарнай плазмы, даследаванні асаблівасцей селектыўнага ўзбуджэння і рэзананснай флуарэсцэнцыі ва ўмовах сутыкняльных і хімічных узаемадзеянняў атамаў і малекул, выкананы разлікі і эксперыментальныя даследаванні дынамікі населенасці ўзбуджаных

станаў пры адна- і двухступенчатым лазерным ўзбуджэнні, прааналізаваны розныя мадэлі энергетычнай схемы ўзроўняў атамаў і малекул. У выніку распрацаваны комплекс метадых для вызначэння абсалютных значэнняў і прасторава-часавых размеркаванняў атамаў, іонаў, малекул і электронаў, якія базіруюцца на прапанаваных мадэлях колькаснай інтэрпрэтацыі флуарэсцэнтных вымярэнняў шчыльнасці часцінак з улікам сутыкняльнай дэактывацыі ўзбуджаных станаў, пачатковых населеннасцяў узроўняў і рэальнай часовай формы лазернага імпульсу.

Распрацаваныя метады паспяхова выкарыстоўваліся для дыягностыкі нізкатэмпературнай газаразраднай, лазерна-абляцыйнай, а таксама высокатэмпературнай плазмы такамака. Сумесна з расійскімі калегамі Віктарам Сямёнавічам з супрацоўнікамі выкананы важны цыкл работ па прымяненні метаду рэзананснай флуарэсцэнцыі для вызначэння параметраў высокатэмпературнай плазмы ва ўстаноўках такамак. Для гэтага былі створаны спецыялізаваныя дыягнастычныя лазерныя комплексы з перанастраіваемай частатой выпраменьвання. Вынікі гэтых работ унеслі значны ўклад у развіццё фізічных мадэляў працэсаў у плазме з тэмпературай у сотні электронвольт, ініцыравалі стварэнне лазерна-флуарэсцэнтных дыягностык на большасці высокатэмпературных плазменных устаноў. Значную навуковую каштоўнасць маюць піянерскія работы па нелінейным пераўтварэнні частаты лазернага выпраменьвання ў вобласць вакуумнага ўльтрафіялету і пашырэнні дыяпазону даўжынь хваляў лазернага выпраменьвання як крыніцы ўзбуджэння флуарэсцэнцыі.

Пачынаючы з канца 1960-х гг. і да цяперашняга часу Віктар Сямёнавіч са сваімі вучнямі пастаянна займаецца эксперыментальнымі даследаваннямі шырокага круга комплексных фізіка-хімічных працэсаў, якія адбываюцца ў зоне ўзаемадзеяння канцэнтраваных энергетычных патокаў з цвёрдай перашкодай. Асноўная ўвага ў гэтых працах нададзена лазернаму абляцыйнаму факелу. З дапамогай прыцягнення лазерных спектраскапічных метадаў для дыягностыкі плазмы атрыманы шэраг новых прыкрытэтных дадзеных, якія тлумачаць важныя аспекты дынамікі фарміравання і эвалюцыі абляцыйнай плазмы.

Так, устаноўлены заканамернасці фарміравання прасторава-часавых размеркаванняў кампанент і асаблівасці сутыкняльных, рэкамбінацыйных хімічных працэсаў у лазерна-абляцыйнай плазме, якая шырока даследуецца ў сувязі з перспектыўнасцю яе выкарыстання ў разнастайных тэхналагічных працэсах. Даследаванні часовай эвалюцыі параметраў плазмы дазволілі вызначыць характэрны час працякання працэсаў рэкамбінацыі іонаў і хімічных рэакцый, высветліць іх ролю ў эвалюцыі лазерна-абляцыйнай плазмы ў газавым асяроддзі. Для лазернай плазмы, што распадаецца ў паветры, вызначаны асноўныя каналы ўтварэння ўзбуджаных малекул аксідаў металаў на позніх стадыях распаду плазмы.

Даследаваны асаблівасці ўтварэння і распаду лазернай плазмы ва ўмовах знешняй іанізаванай атмасферы. Устаноўлена павялічэнне працягласці існавання плазмы пры наяўнасці іанізаванага навакольнага асяроддзя. Павялічэнне эмісіі плазмы адбываецца як за кошт павялічэння колькасці выносімага матэрыялу, так і большага аб'ёму плазмы і больш аднароднага размеркавання шчыльнасці і тэмпературы электронаў у выніковай плазме. Устаноўлена карэляцыя кампанентнага складу, кінетычных параметраў лазерна-абляцыйнага патоку і параметраў лазернага выпраменьвання (шчыльнасці магутнасці і даўжыні хвалі). Паказана, што эфектыўнасць працэсу фарміравання ўзбуджаных атамаў і іонаў значна павялічваецца ў двухімпульсных рэжымах абляцыі пры рэзанансным характары другога імпульсу, што стварае спрыяльныя ўмовы для ўтварэння хімічных злучэнняў.

Для вызначэння канцэнтрацыі атамаў, іонаў і малекул у плазме быў распрацаваны і створаны лазерна-флуарэсцэнтны комплекс. Адметнай яго асаблівасцю з'яўляецца магчымасць рэалізацыі двухмерных прасторавых вымярэнняў, якія павышаюць эфектыўнасць даследаванняў у галіне кінетыкі фізіка-хімічных працэсаў у нестацыянарных плазменных асяроддзях, што ў сваю чаргу дазваляе аптымізаваць плазмахімічныя і лазерна-плазменныя тэхналогіі на падставе апэратыўнай дыягностыкі кампанентнага саставу плазмы. Акрамя дыягнастычных задач лазерна-флуарэсцэнтны комплекс можа выкарыстоўвацца для вырашэння аналітычных задач і знайсці прымяненне ў спектральным аналізе, экалогіі, медыцыне.

Асобна трэба вылучыць праблему кіравання эфектыўнасцю фізіка-хімічных пераўтварэнняў у нераўнаважных лазерна-плазменных асяроддзях, рашэнне якой важна для аптымізацыі іх кампанентнага і зарадавага складу. Паказана, што мэтанакіраваная змена адноснага зместу і прасторава-часовай структуры кампанент лазернай плазмы магчыма як на падставе змены знешніх умоў стварэння плазмы, так і з дапамогай стымулявання асобных каналаў рэакцый пры дадатковым узбуджэнні рэагентаў. Варыяцыя ўмоў стварэння плазмы, у прыватнасці плошчы зоны апрамянення мішэні і шчыльнасці патоку выпраменьвання, выклікае змену эфектыўнасці праходжання рэакцыі акіслення з прычыны змены ўмоў перамешвання на мяжы плазменнага фронту, якія вызначаюць паступленне кіслароду ў аб'ём факела.

Павелічэнне канцэнтрацыі ўзбуджаных рэагентаў ў лазерна-абляцыйнай плазме можа быць рэалізавана і пад дзеяннем дадатковага імпульсу лазернага выпраменьвання, які дзейнічае на мішэнь, а таксама шляхам селектыўнай накачкі ўзбуджаных станаў атамаў рэзанансным лазерным выпраменьваннем. На прыкладзе рэакцыі акіслення атамаў тытана паказана павелічэнне канцэнтрацыі прадуктаў у больш высокіх электронна-вагальных станах і прадэманстравана магчымасць стымулявання эндатэрмічнай рэакцыі ўтварэння нітрыдаў тытана ў выніку дадатковага лазерна-індуцыраванага ўзбуджэння рэагентаў.

На аснове выкананых даследаванняў прапанаваны і рэалізаваны спосабы кіравання прасторава-часовымі размеркаваннямі кампанент і мэтанакіраванага стымулявання фізіка-хімічных пераўтварэнняў у нераўнаважнай плазме для аптымізацыі яе кампанентнага і зарадавага складу. Вынікі гэтых работ паглыбляюць існуючыя ўяўленні пра механізмы ўзаемадзеяння патокаў выпраменьвання з рэчывам і кінэтыкі фізіка-хімічных працэсаў у нераўнаважных плазменных асяроддзях і таму маюць фундаментальнае значэнне. Атрыманыя вынікі, акрамя чыста навуковай значнасці, перспектыўныя для кіравання кампанентным складам і аптымізацыі лазерна-плазменных метадаў фарміравання пучкоў часціц, мадыфікацыі і ачысткі паверхні, атрымання нанаразмерных структур і г. д.

Вынікі даследаванняў рэалізаваны таксама ў спектральна-аналітычнай практыцы. Як ужо азначалася, першыя навуковыя працы В. С. Буракова былі звязаны з развіццём аналітычнай практыкі атамнага спектральнага аналізу. Аўтарам унесены важны ўклад у шырокае ўкараненне гэтага прагрэсіўнага метаду кантролю складу рэчыва ў шматлікіх заводскіх і навукова-даследчых лабараторыях Беларусі. Развіццё канкрэтных метадык грунтавалася на вывучэнні працэсаў, якія праходзяць у воблаку газавага разраду ў залежнасці ад рэжыму і параметраў працы іскравых і дугавых крыніц узбуджэння. В. С. Бураковым упершыню вылучана ідэя ўплыву нераўнамернасці паступлення рэчыва з электродаў складанага валавога складу на памеры воблака плазмы, эфектыўнасць выкарыстання парападобнай фазы рэчыва ў фарміраванні інтэнсіўнасці спектральных ліній. Гэта ідэя знайшла далейшае развіццё ў працах шэрага даследчыкаў.

Вялікую ўвагу В. С. Буракоў надаваў развіццю лазернага прыладабудавання. Пад яго кіраўніцтвам быў распрацаваны і створаны першы ў Беларусі эксімерны лазер, а таксама праведзены даследаванні працэсаў фарміравання спектральных, часавых, энергетычных і прасторавых характарыстык выпраменьвання эксімерных лазераў са спектральна селектыўнымі і няўстойлівымі рэзанатарамі, створаны крыніцы выпраменьвання з заданымі параметрамі: вузкай лініяй і малой разыходнасцю пучка. Гэта паслужыла падставай для шэрагу практычных прымяненняў распрацаваных лазераў у нелінейнай аптыцы, у прыватнасці для генерацыі кампанент вымушанага камбінацыйнага рассеяння ў сціснутых газах. Створаныя лазеры знайшлі таксама прымяненне ў лідарнай сістэме дыстанцыйнага кантролю стратасфернага азону, што важна для вырашэння праблемы маніторынгу міжрэгіянальнага пераносу забруджвання ў атмасферы Зямлі.

В. С. Буракоў не перастае здзіўляць калег сваёй творчай актыўнасцю. Сёння навуковыя інтарэсы даследчыка накіраваны на вырашэнне адной з актуальных задач сучаснай фізікі – устанавленне заканамернасцей утварэння кластэраў і нанаразмерных структур у плазме, у прыватнасці лазерна-абляцыйнай плазме, фарміруемай як у газах, так і вадкасцях. Пакладзены пачатак новаму навуковаму кірунку – распрацоўцы плазмаактываванага сінтэзу нанаразмерных

часцінак на аснове працэсаў лазернай і электрычнай эрозіі ў вадкіх асяроддзях, які паказаў сваю перспектыўнасць для стварэння новых матэрыялаў з мадыфікаванымі характарыстыкамі і іх практычнага выкарыстання.

Атрымоўваюць новае жыццё і раней выказаныя В. С. Бураковым ідэі, адна з якіх – магчымасць распрацоўкі безэталоўнага экспрэснага метаду лазернага мікрааналізу для вызначэння колькаснага кампанентнага складу рэчыва. Распрацаваныя прыклады такіх метадык для вырабаў з металяў, у тым ліку каляровых і каштоўных, а таксама прадметаў, якія ўяўляюць гісторыка-мастацкую каштоўнасць (археалагічныя знаходкі, карціны, ювелірныя ўпрыгажэнні) паказалі прынцыпова важнае значэнне метаду для спектрааналітычнай практыкі ў Беларусі, таму што экспрэсны аналіз забяспечваецца ў рэжыме, бліжэй да неразбуральнага кантролю, без неабходнасці прымянення сертыфікаваных стандартных узораў, вытворчасць якіх у нашай краіне адсутнічае.

Устаноўленыя аптымальныя ўмовы выкарыстання лазерна-аб'яцыйнай плазмы ў метадах двухімпульснай эмісійнай спектраскапіі забяспечылі павышэнне адчувальнасці спектральнага аналізу з лазернай атамізацыяй рэчыва. У прыватнасці, аптымізаваны часавы інтэрвал і аналітычная зона рэгістрацыі эмісійных ліній (аптымальная часавая і прасторавая лакалізацыя атамаў і іонаў) з мэтай, па-першае, рэалізацыі максімальнай суадносін сігнал/шум лінейчатага спектра пераважна атамнай кампаненты і, па-другое, дыскрымінацыі ўкладу кантынуума. Высветлена, у якой ступені недакладнасць вымярэння тэмпературы плазмы (або неўзнаўленні тэмпературы ад імпульса да імпульса пры правядзенні статычных вымярэнняў) і, адпаведна, канцэнтрацыі электронаў уплывае на канчатковы рэзультат – велічыню канцэнтрацыі вызначаемага элемента.

Акадэміку В. С. Буракову ўласцівы лепшыя рысы вучонага: мэтанакіраванасць, прынцыповасць і добразычлівасць, пастаянны пошук перспектыўных кірункаў даследаванняў, інтуіцыя, заснаваная на шырокім дыяпазоне ведаў і дэталёвым уліку запатрабаванняў практыкі. Ідэі Віктара Сямёнавіча актыўна развіваюцца яго шматлікімі вучнямі, сярод якіх 3 доктара і 16 кандыдатаў навук. За навуковыя дасягненні ў галіне фізікі ў 1974 г. яму прысуджана Дзяржаўная прэмія БССР.

За вялікі ўнесак у навуку і плённую навукова-арганізацыйную дзейнасць В. С. Буракоў узнагароджаны ордэнам Працоўнага Чырвонага Сцяга, ордэнам Айчыны III ступені, Ганаровай граматай Вярхоўнага Савета БССР і медалямі.

Рэдкалегія часопіса, калегі і вучні Віктара Сямёнавіча сардэчна віншуюць яго з юбілеем і жадаюць моцнага здароўя, навуковага даўгалецця і новых творчых дасягненняў.

ЛЕВ МИТРОФАНОВИЧ ТОМИЛЬЧИК**(К 85-летию со дня рождения)**

1 апреля исполнилось 85 лет со дня рождения известного белорусского физика-теоретика, члена-корреспондента Национальной академии наук Беларуси, доктора физико-математических наук, профессора Льва Митрофановича Томильчика.

Лев Митрофанович родился в Минске. В 1949 г. он окончил среднюю школу и поступил в Белорусский государственный университет на физико-математический факультет (отделение физики). В 1954 г. получил университетский диплом с отличием и продолжил учебу в аспирантуре БГУ на кафедре теоретической физики под руководством Ф. И. Федорова. Выполненные в годы аспирантуры работы по оптике магнитных кристаллов легли в основу кандидатской диссертации «Электромагнитные волны в проводящих магнитных анизотропных средах». Л. М. Томильчик построил феноменологическую теорию распространения электромагнитных волн в неограниченных

средах, обладающих произвольной анизотропией диэлектрических, магнитных и поглощающих свойств. На ее базе была впервые дана исчерпывающая классификация поглощающих магнитных кристаллов по их оптическим свойствам.

В октябре 1957 г. молодой ученый пришел на работу в Институт физики АН БССР. С тех пор научная судьба Льва Митрофановича неразрывно связана с академией и институтом, где он возглавлял лабораторию теоретической физики, а в настоящее время является главным научным сотрудником этой лаборатории. После защиты кандидатской диссертации Л. М. Томильчик достаточно резко поменял тематику исследований. Его увлекла не очень популярная в то время проблема магнитного монополя. И уже в 1963 г. вышла в свет его работа о несовместимости гипотезы о существовании магнитного заряда с требованием инвариантности электродинамики относительно пространственных отражений. Эта работа положила начало созданию в Беларуси нового научного направления, а впоследствии и школы по весьма актуальной и разнообразной сегодня тематике, объединяемой термином «магнитный монополю».

Результаты первого этапа исследований в этом направлении были обобщены в фундаментальной монографии «Электродинамика с магнитным зарядом», написанной Львом Митрофановичем совместно с В. И. Стражевым. Наряду с работами по теории магнитных монополей Л. М. Томильчик получил серию интересных результатов по непрерывной дуальной симметрии уравнений электродинамики. Из них к числу фундаментальных относятся: критический анализ различных лагранжевых подходов в теории магнитного заряда; построение явного вида дуальных токов; расчет ряда модельных квантовомеханических систем на фоне монополярных потенциалов; решение так называемой проблемы Липкина – Вайсберга – Пешкина и многие другие. Они были обобщены в докторской диссертации ученого «Дуальная инвариантность и магнитный заряд в электродинамике», успешно защищенной в декабре 1979 г. Несомненным личным научным достижением Л. М. Томильчика было использование в 1971 г. для классификации адронных резонансов специфической алгебры, содержащей одновременно как коммутаторы, так и антикоммутаторы своих образующих, что, как стало ясно позднее, было первым примером построения суперсимметричной алгебры.

Л. М. Томильчиком совместно с учениками развит оригинальный способ геометрического описания классических и квантовых систем многих частиц с потенциалами, зависящими от скорости. Этот подход идейно связан с исследованиями запирающих эффектов конформноплоской метрики специального вида (системы с максимальным ускорением). Лев Митрофанович фактически был первым, кто геометризовал феноменологическую релятивистскую модель конфайнмента кварков, использующую так называемый лоренц-скалярный потенциал или координатную зависимость массы.

Среди новейших результатов следует отметить весьма эффективную геометризацию взаимодействия частиц на основе использования пространства отрицательной кривизны, что позволило, с одной стороны, построить квантовомеханическую модель дейтрона, которая точно воспроизводит современные экспериментальные данные, а с другой – успешно промоделировать электронные состояния в полупроводниковой квантовой точке. Несомненный интерес представляет также феноменологическая взаимно-инвариантная гамильтонова модель, в рамках которой дано описание характерных особенностей внутригалактических движений и, в частности, достаточно точно аппроксимируется вид эмпирических ротационных кривых типичных спиральных галактик. За эти, а также другие работы Л. М. Томильчик был удостоен премии им. Ф. И. Федорова Национальной академии наук Беларуси.

Научная работа Льва Митрофановича тесно связана с его педагогической деятельностью. Целое поколение белорусских физиков выросло на его прекрасных лекциях по квантовой механике, теории групп и физике элементарных частиц. Нельзя не отметить, что на протяжении многих лет Лев Митрофанович читал летом лекции в Национальном детском образовательно-оздоровительном центре «Зубренок», и некоторые из его юных слушателей впоследствии не только пришли в науку, но и защитили диссертации.

Около тридцати пяти лет Л. М. Томильчик работает в системе аттестации научных кадров в качестве члена ученого совета по защитам, а последние 20 лет возглавляет совет по защитам докторских диссертаций по теоретической физике, физике высоких энергий, физике атомного ядра и элементарных частиц при Институте физики НАН Беларуси. Под его руководством защищено 11 кандидатских диссертаций, один из его непосредственных учеников стал доктором наук.

Избрание Л. М. Томильчика членом-корреспондентом АН БССР в 1989 г. стало признанием его личного вклада в науку и создание научной школы.

Лев Митрофанович ведет большую научно-организационную работу не только в рамках Института физики. С момента образования в 1963 г. Отделения физико-математических наук АН БССР он в течение семи лет работал здесь ученым секретарем. Именно в этот период ученый начал исследования по истории и методологии науки, совместно с нынешним научным руководителем Института философии РАН, академиком В. С. Степиным провел глубокий анализ процесса возникновения максвелловской электродинамики. Результаты этих исследований (наряду с теми, которые вошли в написанную им совместно с В. С. Степиным в 1970 г. книгу «Практическая природа познания и методологические проблемы современной физики», посвященную концептуальному анализу квантовой механики) легли в основу нового современного направления в истории и методологии науки. Впоследствии развитая схема возникновения нового теоретического знания была успешно применена к анализу становления квантовых и релятивистских представлений. Новый импульс этим исследованиям в конце 1980-х гг. придало взаимообогащающее сотрудничество Льва Митрофановича с замечательным физиком и историком науки академиком М. А. Ельяшевичем.

Весьма существенный вклад внесен Л. М. Томильчиком в понимание механизма принятия новых идей научным сообществом. Действенный характер предложенных критериев ассимиляции научного знания убедительно продемонстрирован им на многочисленных примерах становления физических концепций XX в.

Историко-методологические исследования, а также богатый опыт рецензирования самых различных работ, мимикрирующих «под науку», способствовали тому, что Лев Митрофанович одним из первых взглянул на проблему псевдонауки как на научно-методологическую проблему.

Сегодня, на переломе тысячелетий, она выросла до общественного явления, изучаемого десятками исследователей во многих странах мира.

Говоря о научной деятельности Л. М. Томильчика, нельзя не упомянуть и о его публицистическом таланте, который проявился в многочисленных публикациях и выступлениях в масс-медиа, посвященных пропаганде науки и ее защите от поспешных реформ «на злобу дня».

Оригинальность мысли, юношеская увлеченность разрабатываемыми проблемами, мягкость в общении с коллегами, наконец, – тонкое чувство юмора являются неотъемлемыми чертами Льва Митрофановича. Его не просто уважают и ценят, но любят как в коллективе Института физики, так и далеко за его пределами.

Лев Митрофанович продолжает активно заниматься научными исследованиями. В последние годы он развил ряд подходов для описания ускоренно расширяющейся Вселенной, основанных на использовании конформной симметрии. Использует принцип взаимной инвариантности М. Борна для описания некоторых возможных эффектов в ранней Вселенной.

Отделение физики, математики и информатики НАН Беларуси и редколлегия журнала желают уважаемому Льву Митрофановичу крепкого здоровья, долгих лет плодотворной жизни в науке и во всех тех ипостасях, которые еще изберет его неиссякаемая творческая натура.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

Редакция журнала «Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук» просит авторов руководствоваться приведенными ниже правилами.

I. Статьи о результатах работ, проведенных в научных учреждениях, должны иметь разрешение на опубликование (сопроводительное письмо ректората или дирекции соответствующего института либо выписку из протокола заседания ученого совета, отдела или кафедры, а также акт экспертизы).

II. Статья предоставляется в редакцию в двух экземплярах на белорусском, русском или английском языках; шрифт – Times New Roman, кегль – 11 (в том числе в формулах); межстрочный интервал – 1,5. Занумерованные формулы выключаются в отдельную строку. Формулировки утверждений (теорем, лемм, предложений и следствий) должны быть выполнены курсивом. В тексте не допускаются рукописные вставки и вклейки. Статья должна быть подписана всеми авторами.

III. Статья должна иметь следующую структуру.

1. Индекс по Универсальной десятичной классификации (УДК);

инициалы и фамилии авторов;

название статьи;

полное наименование учреждений, где работают авторы, с указанием города и страны, адрес электронной почты каждого автора.

2. Аннотация (авторское резюме) объемом 150–250 слов должна кратко представлять результаты работы и быть понятной, в том числе и в отрыве от основного текста статьи; должна быть информативной, хорошо структурированной (один из вариантов написания аннотации – краткое повторение структуры статьи, включающее введение, цели и задачи, методы, результаты, заключение или выводы).

3. Ключевые слова – набор слов, отражающих содержание текста в терминах объекта, научной отрасли и методов исследования; рекомендуемое количество ключевых слов 5–10.

4. Затем метатекстовые данные (все то, что предшествует основному тексту статьи) приводят-

ся на английском языке, причем аннотация должна быть оригинальной (т. е. не являться дословным переводом русскоязычной аннотации). Если статья англоязычная – вышеуказанные данные приводятся на русском (белорусском) языке.

5. Основной текст статьи не должен превышать 16 с. (т. е. около 40 тыс. знаков); в этот объем также входят таблицы и рисунки (до 7–8). Изложенный материал должен быть четко структурированным: введение, цели и задачи, методы, результаты, заключение (выводы). В русско- и белорусскоязычных статьях рекомендуется делать подрисовочные подписи и надписи на самих иллюстрациях на двух языках – русском (белорусском) и английском.

6. «Список использованной литературы» (не более 40 ссылок) оформляется в соответствии с требованиями Высшей аттестационной комиссии Республики Беларусь (ГОСТ 7.1-2003). Цитируемая литература приводится общим списком по мере упоминания, ссылки в тексте даются порядковым номером в квадратных скобках (напр., [1]); ссылки на неопубликованные работы не допускаются.

7. Затем приводится список цитированных источников в романском алфавите (латиница) («References») со следующей структурой: авторы (транслитерация), название статьи в транслитерированном варианте [перевод названия статьи на английский язык в квадратных скобках], название русскоязычного источника (транслитерация) [перевод названия источника на английский язык – парафраз (для журналов можно не делать)], выходные данные с обозначениями на английском языке.

Примеры подготовлены по материалам методических рекомендаций «Редакционная подготовка научных журналов для включения в зарубежные индексы цитирования» О. В. Кирилловой (http://elsevier-science.ru/files/kirillova_editorial.pdf).

• Статьи из журналов:

Zagurenko A. G., Korotovskikh V. A., Kolesnikov A. A., Timonov A. V., Kardymon D. V. Tekhniko-ekonomicheskaya optimizatsiya dizaina gidrorazryva plasta [Techno-economic optimization of the design of hydraulic fracturing]. Neftyanoe khozyaistvo = Oil Industry, 2008, no.11, pp. 54-57.

• Описание статьи из электронного источника:

Swaminathan V., Lepkoswka-White E., Rao B. P. Browsers or buyers in cyberspace? An investigation of electronic factors influencing electronic exchange. Journal of Computer-Mediated Communication, 1999, vol. 5, no. 2. Available at: <http://www.ascusc.org/jcmc/vol5/issue2/> (Accessed 28 April 2011).

• **Описание статьи с DOI:**

Zhang Z., Zhu D. *Experimental research on the localized electrochemical micromachining*. *Russian Journal of Electrochemistry*, 2008, vol. 44, no. 8, pp. 926-930. doi: 10.1134/S1023193508080077.

• **Описание статьи из продолжающегося издания (сборника трудов):**

Astakhov M. V., Tagantsev T. V. Eksperimental'noe issledovanie prochnosti soedinenii «stal'-kompozit» [*Experimental study of the strength of joints "steel-composite"*]. *Trudy MGTU «Matematicheskoe modelirovanie slozhnykh tekhnicheskikh sistem»* [*Proc. of the Bauman MSTU "Mathematical Modeling of Complex Technical Systems"*], 2006, no. 593, pp. 125-130.

• **Описание материалов конференций:**

Usmanov T. S., Gusmanov A. A., Mullagalin I. Z., Muhametshina R. Ju., Chervyakova A. N., Sveshnikov A. V. Osobennosti proektirovaniya razrabotki mestorozhdeniy s primeneniem gidrorazryva plasta [*Features of the design of field development with the use of hydraulic fracturing*]. *Trudy 6 Mezhdunarodnogo Simpoziuma "Novye resursosberegayushchie tekhnologii nedropol'zovaniya i povysheniya neftegazootdachi"* [*Proc. 6th Int. Symp. "New energy saving subsoil technologies and the increasing of the oil and gas impact"*]. Moscow, 2007, pp. 267-272.

• **Описание книги (монографии, сборники):**

Izvekov V. I., Serikhin N. A., Abramov A. I. *Proektirovanie turbogeneratorov* [*Design of turbo-generators*]. Moscow, MEI Publ., 2005, 440 p.

• **Описание Интернет-ресурса:**

APA Style (2011). Available at: <http://www.apastyle.org/apa-style-help.aspx> (accessed 5 February 2011).

Pravila Tsitirovaniya Istochnikov (*Rules for the Citing of Sources*) Available at: <http://www.scribd.com/doc/1034528/> (accessed 7 February 2011)

• **Описание диссертации или автореферата диссертации:**

Semenov V. I. *Matematicheskoe modelirovanie plazmy v sisteme kompaktnyi tor*. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk [*Mathematical modeling of the plasma in the compact torus. Dr. phys. and math. sci. diss.*]. Moscow, 2003. 272 p.

• **Описание ГОСТа:**

GOST 8.586.5-2005. Metodika vypolneniia izmerenii. Izmerenie raskhoda i kolichestva zhidkosti i gazov s pomoshch'iu standartnykh suzhaiushchikh ustroystv [*State Standard 8.586.5 – 2005. Method of measurement. Measurement of flow rate and volume of liquids and gases by means of orifice devices*]. Moscow, Standartinform Publ., 2007. 10 p.

• **Описание патента:**

Palkin M. V., e.a. Sposob orientirovaniia po krenu letatel'nogo apparata s opticheskoi golovkoi samonavedeniia [*The way to orient on the roll of aircraft with optical homing head*]. Patent RF, no. 2280590, 2006.

8. Если присутствует информация о финансировании (поддержке грантами проектов и т. п.), ее следует давать *на русском (белорусском) и английском языках* под заголовками «Благодарности» («Acknowledgements»).

IV. Для подготовки метаданных (так называемый информационный лист) на отдельной странице следует указать *на русском и английском языках* для каждого автора: фамилию, имя и отчество (полностью), ученую степень, звание, должность, место работы с указанием адреса, контактную информацию (e-mail, телефоны).

V. Электронный вариант статьи предоставляется на диске, флешке или присылается по электронной почте в редакцию журнала – fmvesti@mail.ru. Текст должен быть набран в Word под Windows, формулы – в редакторе MathType. Собственным редактором формул версий Microsoft Office 2007 и выше пользоваться нельзя, так как в редакционно-издательском процессе он не поддержива-

ется. Вставку символов выполнять через меню «Вставка\Символ». Выключку вверх и вниз (C², C₄) выполнять через меню «Формат\Шрифт\Верхний индекс», «Формат\Шрифт\Нижний индекс». Латинские буквы необходимо набирать *курсивом*, греческие – прямо (для набора греческих символов следует пользоваться гарнитурой Symbol). Обозначения математических функций (lim, sup, ln, sin, Re, Im и т. п.), символы химических элементов (N, Cl) также набираются прямым шрифтом.

VI. Черно-белые и цветные рисунки вставляются в текст статьи (Word), а также даются в виде отдельных файлов в формате tif (600 точек на дюйм). Желательно также предоставлять их в формате оригинала (Corel, диаграммы в Excel, Origin Pro и т. д.), т. е. в той программе, в которой они выполнены. Текст на рисунках набирается основной гарнитурой, причем начертание символов (греческое, латинское) должно соответствовать их начертанию в тексте. Размер кегля соизмерим с раз-

мером рисунка (желательно 8 пунктов). На обороте рисунков (если они даются отдельно) указываются фамилии авторов, название статьи. Фотографии предоставляются в виде файлов (tif, jpg, png, eps) и в распечатанном виде.

VII. Поступившая в редакцию статья направляется на рецензию, затем визируется членом редколлегии. Основным критерием целесообразности публикации является новизна и информативность статьи. Если по рекомендации рецензента статья возвращается автору на доработку, то переработан-

ная рукопись вновь рассматривается редколлегией. Статьи не по профилю журнала возвращаются авторам после заключения редколлегии.

Материалы для публикации следует направлять по адресу: ул. Академическая, 1, к. 119, редакция журнала «Весті НАН Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук», 220072, г. Минск, Республика Беларусь; тел. для справок: +375 17 369 77 00 (среда); +375 17 284 19 19 (четверг, пятница), либо по электронной почте: fmvesti@mail.ru, либо через онлайн-форму на сайте.