

ISSN 0002-3574 (print)

ВЕСЦІ

НАЦЫЯНАЛЬнай
АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ

СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК НАВУК. 2016. № 4

ИЗВЕСТИЯ

НАЦИОНАЛЬНОЙ
АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ

СЕРИЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК. 2016. № 4

Журнал основан в январе 1965 г.

Выходит четыре раза в год

Учредитель – Национальная академия наук Беларуси

Журнал зарегистрирован в Министерстве информации Республики Беларусь,
свидетельство о регистрации № 392 от 18.05.2009

*Входит в Перечень научных изданий Республики Беларусь
для опубликования результатов диссертационных исследований,
включен в базу данных Российского индекса научного цитирования (РИНЦ)*

Главный редактор

С. Я. Килин

Редакционная коллегия

Н. М. Олехнович (заместитель главного редактора),

В. А. Орлович (заместитель главного редактора),

Т. Е. Янчук (ведущий редактор журнала)

С. В. Абламейко, С. М. Абрамов (Российская Федерация), **В. М. Анишик,**
А. И. Белоус, И. В. Гайшун, С. В. Гапоненко, А. М. Гончаренко, А. П. Достанко,
Н. А. Изобов, Н. С. Казак, В. И. Корзюк, Ф. П. Коршунов,
Ю. А. Курочкин, Н. А. Поклонский, С. А. Тихомиров,
Л. М. Томильчик, А. В. Тузиков, Ю. С. Харин,
А. Ф. Чернявский, Л. А. Янович, В. И. Янчевский

Редакционный совет

С. Я. Килин (Республика Беларусь)
С. В. Абламейко (Республика Беларусь)
Ж. И. Алферов (Российская Федерация)
А. Л. Асеев (Российская Федерация)
И. В. Гайшун (Республика Беларусь)
А. М. Желтиков (Российская Федерация)
В. В. Козлов (Российская Федерация)
Г. Лейсх (Федеративная Республика Германия)
Д. С. Могилевцев (Республика Беларусь)
Й. Врахтруп (Федеративная Республика Германия)
В. А. Орлович (Республика Беларусь)
А. Цайлингер (Австрийская Республика)

Адрес редакции:

*ул. Академическая, 1, к. 119, 220072, г. Минск, Республика Беларусь.
Тел.: + 375 17 284-19-19; e-mail: fmvesti@mail.ru*

vestifm.belnauka.by

ИЗВЕСТИЯ НАЦИОНАЛЬНОЙ АКАДЕМИИ НАУК БЕЛАРУСИ.

Серия физико-математических наук. 2016. № 4.

Выходит на русском, белорусском и английском языках

Редактор *Т. Е. Янчук*

Компьютерная вёрстка *О. Л. Смольской*

Подписано в печать 15.12.2016. Выход в свет 28.12.2016. Формат 60×84¹/₈. Бумага офсетная.

Печать цифровая. Усл. печ. л. 14,88. Уч.-изд. л. 16,4. Тираж 68 экз. Заказ 246.

Цена: индивидуальная подписка – 10,28 руб., ведомственная подписка – 25,21 руб.

Издатель и полиграфическое исполнение:

Республиканское унитарное предприятие «Издательский дом «Беларуская навука».

Свидетельство о государственной регистрации издателя, изготовителя, распространителя печатных изданий № 1/18 от 02.08.2013. ЛП № 02330/455 от 30.12.2013. Ул. Ф. Скорины, 40, 220141, г. Минск, Республика Беларусь

© РУП «Издательский дом «Беларуская навука»,
Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук, 2016

PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS

PHYSIC AND MATHEMATICS SERIES, 2016, no. 4

The Journal was founded in January 1965

Periodicity is 4 issues per annum

Founder is the National Academy of Sciences of Belarus

The journal is registered on May 18, 2009 by the Ministry of Information of the Republic of Belarus
in the State Registry of Mass Media, reg. no. 392

*The Journal is included in The List of Journals for Publication
of the Results of Dissertation Research in the Republic of Belarus
and in the database of Russian Science Citation Index (RSCI)*

Editor-in-Chief

S. Ya. Kilin

Editorial Board

N. M. Olekhovich (*Associate Editor-in-Chief*)

V. A. Orlovich (*Associate Editor-in-Chief*)

T. E. Yanchuk (*lead editor*)

S. V. Ablameyko, S. M. Abramov (Russian Federation), **V. M. Anishik, A. I. Belous,**
I. V. Gaishun, S. V. Gaponenko, A. M. Goncharenko, A. P. Dostanko,
N. A. Izobov, N. S. Kazak, V. I. Korzyuk, F. P. Korshunov,
Yu. A. Kurochkin, N. A. Poklonskii, S. A. Tikhomirov, L. M. Tomil'chik,
A. V. Tuzikov, Yu. S. Kharin, A. F. Chernyavskii,
L. A. Yanovich, V. I. Yanchevskii

Editorial Council

S. Ya. Kilin (Republic of Belarus)

S. V. Ablameyko (Republic of Belarus)

Z. I. Alferov (Russian Federation)

A. L. Aseev (Russian Federation)

I. V. Gaishun (Republic of Belarus)

A. M. Zheltikov (Russian Federation)

V. V. Kozlov (Russian Federation)

G. Leuchs (Federal Republic of Germany)

D. S. Mogilevtsev (Republic of Belarus)

J. Wrachtrup (Federal Republic of Germany)

V. A. Orlovich (Republic of Belarus)

A. Zeilinger (Republic of Austria)

Address of the Editorial Office:
Akademicheskaya Str., room 119, 220072, Minsk, Republic of Belarus.
Tel.: + 375 17 284-19-19; e-mail: fmvesti@mail.ru
vestifm.belnauka.by

PROCEEDING OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS.

Physic and Mathematics series, 2016, no. 4.

Printed in Russian, Belarusian and English languages

Editor *T. E. Yanchuk*
Computer imposition *O. L. Smolskaya*

It is sent of the press 15.12.2016. Appearance 28.12.2016. Format 60×84¹/₈. Offset paper.
The press digital. Printed pages 14,88. Publisher's signatures 16,4. Circulation 68 copies. Order 246.
Price: individual subscription – 10,28 byn., departmental subscription – 25,21 byn.

Publisher and printing execution:

Republican unitary enterprise "Publishing House "Belaruskaya Navuka".
Certificate on the state registration of the publisher, manufacturer, distributor of printing editions
No. 1/18 dated August 2, 2013. License for the press no. 02330/455 dated December 30, 2013.
Address: F. Scorina Str., 40, 220141, Minsk, Republic of Belarus.

© RUE "Publishing House "Belaruskaya Navuka",
Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physic and Mathematics series, 2016

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Гринь А. А., Кузьмич А. В. Точные оценки числа предельных циклов автономных систем с тремя точками покоя на плоскости	7
Воробьев Н. Н., Кузнецова А. Р. Об индуктивных решетках насыщенных формаций	18
Муха В. С. Симметричная аппроксимация векторных статистических данных линейными многообразиями	23
Малютин В. Б. Вычисление функциональных интегралов с помощью последовательностей Штурма	32
Во Тхи Ким Туен. Монотонные разностные схемы для модели Шнэкенберг	38
Ле Минь Хиену. Безусловно монотонные разностные схемы второго порядка аппроксимации на равномерных сетках для Гамма-уравнения	47
Каянович С. С. Краевая задача для стержневого течения в канале	55

ФИЗИКА

Станчик А. В., Барайшук С. М., Башкиров С. А., Гременок В. Ф., Тиванов М. С., Дергачева М. Б., Уразов К. А. Исследование тонких пленок $Cu_2ZnSnSe_4$ методом атомно-силовой микроскопии	67
Гуртовой В. Г., Шелег А. У. Изменение диэлектрических свойств монокристаллов Cu_2ZnSnS_4 под действием электронного облучения	76
Попов И. А., Щелчков А. В., Скрыпник А. Н., Зубков Н. Н., Жукова Ю. В., Чорный А. Д., Сверчков С. А. Численное и экспериментальное исследование гидравлического сопротивления труб с внутренним спиральным оребрением, нанесенным методом деформирующего резания	82
Шапошников В. Л., Кривошеева А. В., Борисенко В. Е. Компьютерное моделирование энергетических зон и оптических параметров дихалькогенидов олова	90
Замковец А. Д., Понявина А. Н., Баран Л. В. Плазмонный резонанс в планарных слоистых наноструктурах серебро-фталоцианин никеля	98

ИНФОРМАТИКА

Гущинский Н. Н., Баттайа О., Долгий А. К оптимизации процессов последовательной обработки партий деталей	106
---	-----

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Юрчук Н. И., Новиков Е. Н. Необходимые условия для существования классических решений уравнения колебаний полуограниченной струны	116
Перечень статей, опубликованных в журнале «Весці Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Серыя фізіка-матэматычных навук» в 2016 году	121

CONTENTS**MATHEMATICS**

Grin A. A., Kuzmich A. V. Precise estimation of limit cycles numbers of autonomous systems with three equilibrium points in the plane	7
Vorob'ev N. N., Kuznetsova A. R. On inductive lattices of saturated formations	18
Mukha V. S. Symmetric approximation of vector statistical data by linear varieties	23
Malyutin V. B. Evaluation of functional integrals using Sturm sequences	32
Vo Thi Kim Tuyen. Monotone difference schemes for the Schnackenberg model	38
Le Minh Hieu. Unconditionally monotone finite difference scheme of the second-order approximation on uniform grids for the Gamma equation.....	47
Kayanovich S. S. Boundary-value problem for plug flow in the channel	55

PHYSICS

Stanchik A. V., Barajshuk S. M., Bashkirov S. A., Gremenok V. F., Tivanov M. S., Dergacheva M. B., Urazov K. A. Investigation of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films by atomic force microscopy	67
Hurtavy V. G., Sheleg A. U. Change in the $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals dielectric properties induced by electron irradiation	76
Popov I. A., Shchelchko A. V., Skrypnik A. N., Zubkov N. N., Zhukova Yu. V., Chorny A. D., Sverchkov S. A. Numerical and experimental study of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning by deforming cutting	82
Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E. Computer simulation of energetic bands and optical parameters of tin dichalcogenides	90
Zamkovets D., Ponyavina A. N., Baran L. V. Plasmon resonance in the planar layered silver-nickel phthalocyanine nanostructures	98

INFORMATICS

Guschinsky N. N., Battaia O., Dolgui A. On optimization of processes for sequential batch machining	106
--	-----

SHORT COMMUNICATIONS

Yurchuk N. I., Novikov E. N. Necessary conditions for existence of classical solutions to the equation of semi-bounded string vibration	116
List of Publications for 2016 in "Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series"	124

МАТЕМАТИКА
MATHEMATICS

УДК 517.925.42

Поступила в редакцию 27.10.2016
Received 27.10.2016

А. А. Гринь, А. В. Кузьмич

Гродненский государственный университет им. Янки Купалы, Гродно, Беларусь

**ТОЧНЫЕ ОЦЕНКИ ЧИСЛА ПРЕДЕЛЬНЫХ ЦИКЛОВ АВТОНОМНЫХ СИСТЕМ
С ТРЕМЯ ТОЧКАМИ ПОКОЯ НА ПЛОСКОСТИ**

Для автономных систем с гладкими правыми частями рассматривается задача точной нелокальной оценки числа предельных циклов в односвязной области вещественной фазовой плоскости, содержащей три простые точки покоя с суммарным индексом Пуанкаре +1. Для решения указанной задачи последовательно строятся две функции Дюлака – Черкаса, с помощью которых находятся замкнутые трансверсальные кривые, разбивающие односвязную область на односвязные, двусвязные и, возможно, одну трехсвязную подобласть. Эффективность разработанного подхода продемонстрирована на примерах полиномиальных систем Льенара, для которых доказано существование в каждой из двусвязных подобластей точно одного предельного цикла, в трехсвязной – точно двух предельных циклов. Установлены конфигурации этих предельных циклов. Полученные результаты могут быть применены в качественной теории и теории бифуркаций обыкновенных дифференциальных уравнений, а также в теории нелинейных колебаний.

Ключевые слова: система Льенара, функция Дюлака – Черкаса, 16-я проблема Гильберта, предельный цикл.

A. A. Grin, A. V. Kuzmich

Yanka Kupala State University of Grodno, Grodno, Belarus

**PRECISE ESTIMATIONS OF LIMIT CYCLES NUMBER OF AUTONOMOUS SYSTEMS
WITH THREE EQUILIBRIUM POINTS IN THE PLANE**

For autonomous systems with smooth right sides the problem of precise non-local estimation of the limit cycles number is considered in a simply-connected domain of a real phase plane containing three equilibrium points with a total Poincaré index +1. To solve this problem, we are constructing successively two Dulac-Cherkas functions which provide the closed transversal curves decomposing the simply-connected domain in simply-connected subdomains, doubly-connected subdomains, and possibly a three-connected subdomain. The efficiency of the developed approach is demonstrated by the examples of the polynomial Liénard systems, for which it is proved that there exist a limit cycle in each of the doubly-connected subdomains and two limit cycles in the three-connected subdomain. We determine the configurations of these limit cycles. The obtained results can be applied in the qualitative theory and in the theory of bifurcations of ordinary differential equations, as well as in the theory of nonlinear oscillations.

Keywords: Liénard system, Dulac-Cherkas function, 16th Hilbert problem, limit cycle.

Введение. Рассмотрим автономную систему на вещественной плоскости

$$\frac{dx}{dt} = P(x, y), \quad \frac{dy}{dt} = Q(x, y), \quad (1)$$

где $P(x, y)$, $Q(x, y)$ – непрерывно дифференцируемые по двум вещественным переменным функции. Одним из методов, позволяющим получить нелокальное решение проблемы оценки числа и локализации предельных циклов [1] системы (1), является признак Дюлака [2–4], усовершенствованный Л. А. Черкасом. При таком подходе, называемом признаком Дюлака – Черкаса,

трансверсальные кривые, соответствующие функции Дюлака, позволяют находить верхнюю оценку числа предельных циклов системы (1) в связной области Ω [5–9]. Для получения точной оценки числа предельных циклов необходимо проводить дополнительные исследования, например точек покоя в бесконечности, что возможно лишь в отдельных случаях. Поэтому целью настоящей работы является разработка способа для получения точной нелокальной оценки числа и локализации предельных циклов в односвязной области Ω , где система (1) имеет три точки покоя: седло и два антиседла. Предлагаемый нами способ основан на последовательном построении двух функций Дюлака – Черкаса, которые используются для нахождения замкнутых трансверсальных кривых, окружающих одну или три точки покоя и разбивающих область Ω на односвязные, двусвязные и, возможно, одну трехсвязную подобласти. Разработанный подход эффективно применен к полиномиальным системам Льенара, для которых доказано, что в каждой двусвязной подобласти имеется точно один предельный цикл, а в трехсвязной – два предельных цикла, определена их конфигурация.

1. Предварительные сведения. Усовершенствованный подход Л. А. Черкаса к признаку Дюлака основан на нахождении функции Дюлака – Черкаса $\Psi \in C^1(\Omega, R)$ [6, с. 199] в области Ω , и действительного числа $k \neq 0$ так, чтобы выполнялось условие

$$\Phi(x, y) = k\Psi \operatorname{div} X + \frac{\partial \Psi}{\partial x} P + \frac{\partial \Psi}{\partial y} Q > 0 (< 0), \quad \forall (x, y) \in \Omega \subset R^2, \quad (2)$$

где $X = (P, Q)$ — векторное поле, определяемое системой (1). В условии (2) обычно допускается [2–6], что функция Φ может принимать нулевое значение в области Ω на множестве меры нуль, но никакая замкнутая кривая этого множества не является предельным циклом системы (1).

З а м е ч а н и е 1. Если Ψ представляет собой функцию Дюлака – Черкаса системы (1) в области Ω , то из соотношения (2) вытекает, что $B = |\Psi|^{\frac{1}{k}}$ является функцией Дюлака в каждой подобласти Ω , где $\Psi > 0 (< 0)$, и любой предельный цикл Γ системы (1), существующий в Ω , является грубым и устойчивым (неустойчивым) при выполнении на нем условия

$$\int_{\Gamma} \operatorname{div} X dt = \int_{\Gamma} \frac{1}{k\Psi} \left(\Phi - \frac{d\Psi}{dt} \right) dt = \int_{\Gamma} \frac{\Phi}{k\Psi} dt < 0 (> 0). \quad (3)$$

При этом локализация предельных циклов в области Ω проводится с помощью трансверсальной кривой

$$W = \{(x, y) \in \Omega : \Psi(x, y) = 0\},$$

которая не может пересекаться предельными циклами системы (1). Соотношение (3) также определяет характер устойчивости точек покоя в каждой подобласти Ω , где $\Psi > 0 (< 0)$.

Т е о р е м а 1 (Признак Дюлака – Черкаса) [6]. Пусть Ω является p -связной областью, где Ψ представляет функцию Дюлака – Черкаса системы (1) в Ω такую, что кривая W состоит из s овалов в Ω . Тогда система (1) имеет не более $p - 1 + s$ предельных циклов в Ω .

То есть в каждой m -связной подобласти $\tilde{\Omega}$ из Ω с границей $\partial\tilde{\Omega} \subset W \cup \partial\Omega$ число предельных циклов не превосходит $m - 1$. В случае односвязной области Ω с единственной точкой покоя – антиседлом – теорема 1 может быть сформулирована в следующем виде [6].

Т е о р е м а 2. Пусть в односвязной области Ω система (1) имеет единственную точку покоя O , являющуюся антиседлом, а Ψ представляет собой функцию Дюлака – Черкаса системы (1) при $k < 0$. Если в области Ω кривая W состоит из s вложенных друг в друга овалов ω_i , окружающих точку O , то в каждой из $s - 1$ кольцеобразных подобластей Ω_i , ограниченных соседними овалами ω_i и ω_{i+1} , система (1) имеет точно один предельный цикл, а в целом она может иметь в области Ω не более s предельных циклов.

2. Основные результаты. Уточним признак Дюлака – Черкаса для области Ω , где система (1) имеет три точки покоя: седло и два антиседла (рис. 1).

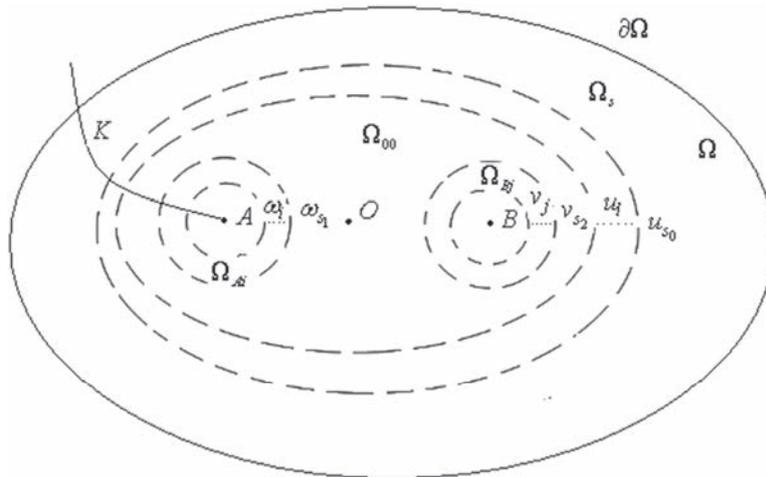


Рис. 1. Расположение точек покоя и овалов кривой W в области Ω
 Fig. 1. Location of the equilibrium points and ovals of curve W in domain Ω

Т е о р е м а 3. Пусть в односвязной области Ω система (1) имеет три точки покоя: два антиседла A и B , и одно седло O , а функция Ψ представляет собой функцию Дюлака – Черкаса системы (1) при $k < 0$. Если в области Ω кривая W состоит из:

- $s_1 \neq 0$ вложенных друг в друга овалов ω_i , окружающих только антиседло A ,
- $s_2 \neq 0$ вложенных друг в друга овалов ν_j , окружающих только антиседло B ,
- $s_0 \neq 0$ вложенных друг в друга овалов u_l , окружающих всю группу точек,

то

1) в каждой из $s_1 - 1$ кольцеобразных подобластей Ω_{A_i} , ограниченных соседними овалами ω_i и ω_{i+1} , в каждой из $s_2 - 1$ кольцеобразных подобластей Ω_{B_j} , ограниченных соседними овалами ν_j и ν_{j+1} , а также в каждой из $s_0 - 1$ кольцеобразных подобластей Ω_l , ограниченных соседними овалами u_l и u_{l+1} , система (1) имеет точно один предельный цикл;

2) в трехсвязной подобласти Ω_{00} , ограниченной внешними овалами ω_{s_1}, ν_{s_2} и внутренним овалом u_1 , у системы (1) может быть одна замкнутая траектория, окружающая все три точки покоя A, B, O , или две замкнутые траектории, имеющие одинаковый характер устойчивости, по одной вокруг каждого антиседла A и B ;

3) в целом система (1) может иметь в области Ω не более $s = s_1 + s_2 + s_0$ предельных циклов.

Д о к а з а т е л ь с т в о. Не теряя общности, будем считать, что в условии (2) выполняется соотношение $\Phi > 0$ в области Ω . Для доказательства первого утверждения теоремы воспользуемся принципом кольца Бендиксона. Для этого на кривой K , выходящей из точки A и пересекающей трансверсально овалы ω_i кривой $\Psi = 0$, окружающие точку A , выберем параметризацию с параметром τ . Тогда функция $\Psi(x, y)$ на кривой K является функцией $\varphi(\tau)$, имеющей простые нули $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{s_1}$, которые соответствуют точкам пересечения кривой K с овалами ω_i . Это означает, что функция $\varphi(\tau)$ меняет знак при переходе через каждый нуль $\tau_i, i = 1, \dots, s_1$. Тогда линии уровня $\Psi(x, y) = C$ в окрестности границы каждой кольцеобразной области Ω_{A_i} , заключенной между соседними овалами ω_i , будут иметь меньший (большой) уровень при $\varphi(\tau) < 0$ ($\varphi(\tau) > 0$)

в рассматриваемой области. Из условия $\Phi > 0$ имеем, что производная $\frac{d\Psi}{dt}$ функции Ψ в силу системы на каждом овале ω_i положительна. Следовательно, траектории системы при увеличении времени пересекают границу каждой подобласти Ω_{A_i} между двумя соседними овалами ω_i изнутри вовне при $\varphi(\tau) < 0$ и извне вовнутрь области при $\varphi(\tau) > 0$. Это доказывает существование предельного цикла в каждой рассматриваемой двусвязной подобласти Ω_{A_i} по принципу кольца. Аналогично доказывается существование предельных циклов в кольцеобразных подобластях Ω_{B_j} , окружающих точку B , а также в кольцеобразных подобластях Ω_l , окружающих все три точки покоя.

Теперь докажем второе утверждение теоремы. В трехсвязной подобласти Ω_{00} согласно классическому признаку Дюлака может существовать не более двух замкнутых траекторий. Теория Пуанкаре – Бендиксона [2] допускает следующие случаи существования предельных циклов:

- 1) в подобласти Ω_{00} нет замкнутых траекторий;
- 2) существует одна замкнутая траектория, окружающая только точку A или только точку B ;
- 3) существует одна замкнутая траектория, окружающая одновременно все три точки покоя A, O, B ;
- 4) существуют две вложенные друг в друга замкнутые траектории, окружающие только точку A или только точку B ;
- 5) существуют две вложенные друг в друга замкнутые траектории, окружающие одновременно все три точки покоя A, O, B ;
- 6) существуют две замкнутые траектории, одна из которых окружает только точку A или только точку B , а вторая траектория окружает одновременно все три точки покоя A, O, B , а также первую замкнутую траекторию;
- 7) существуют две замкнутые траектории, одна из которых окружает только точку A , а вторая траектория окружает только точку B .

Теперь рассмотрим влияние функции $\Psi(x, y)$, используя соотношение (3), на возможность реализации вышеперечисленных случаев, учитывая, что овалы ω_{s_1}, ν_{s_2} и u_1 как границы подобласти Ω_{00} при $t \rightarrow +\infty$ пересекаются траекториями системы только изнутри вовне (только извне вовнутрь) если $\Psi > 0$ ($\Psi < 0$) в подобласти Ω_{00} . Не теряя общности, будем полагать, что $\Psi < 0$ в Ω_{00} , тогда траектории системы могут пересекать овалы ω_{s_1}, ν_{s_2} и u_1 только трансверсально изнутри вовне, а любая особая траектория в подобласти Ω_{00} должна быть неустойчивой.

Существование функции Дюлака – Черкаса приводит к противоречию с фактами классической качественной теории при рассмотрении случаев 1, 2, 4–6, что исключает описанные в них расположения предельных циклов. А именно, согласно теории Пуанкаре – Бендиксона [2] обе ω -сепаратрисы седла O должны или приходить в подобласть Ω_{00} извне при $t \rightarrow +\infty$ или стремиться к неустойчивой особой траектории при $t \rightarrow -\infty$. В случае 1 существование функции Ψ исключает такую возможность для обеих ω -сепаратрис. В случае 2 существование функции Ψ исключает такую возможность для одной из двух ω -сепаратрис.

Предположим, что выполняется один из случаев 4–6. Тогда в силу соотношения (3) обе замкнутые траектории должны быть неустойчивыми, из чего следует, что между ними должна существовать еще устойчивая замкнутая траектория. Но это невозможно, поскольку в трехсвязной подобласти Ω_{00} не может быть более двух замкнутых траекторий.

В случаях 3 и 7 противоречий нет, и возможные фазовые портреты представлены на рис. 2 и 3 (A, B) соответственно, где предельные циклы изображены сплошной линией. В случае 7 движение изображающей точки на двух предельных циклах при $t \rightarrow +\infty$ может проходить как в одном направлении (рис. 3, A), так и в противоположных направлениях (рис. 3, B).

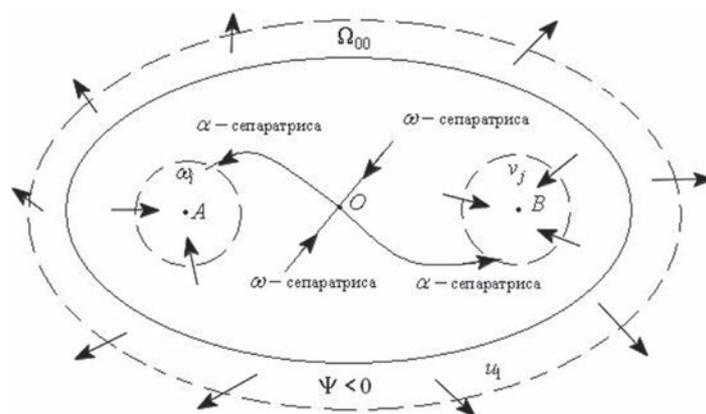


Рис. 2. Фазовый портрет для случая 3 из теоремы 3
 Fig 2. Phase portrait for case 3 from theorem 3

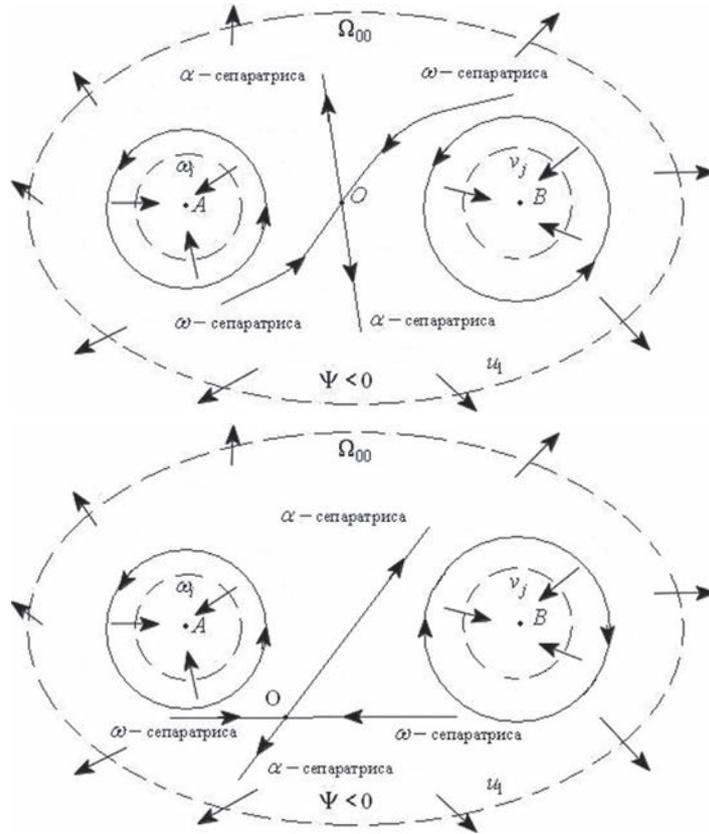


Рис. 3. Фазовые портреты для случая 7 из теоремы 3
 Fig 3. Phase portraits for case 7 from theorem 3

Дополнительный предельный цикл может существовать в двусвязной области Ω_s , расположенной между внешним овалом u_{s_0} кривой W и границей $\partial\Omega$ области Ω . Таким образом, в области Ω система (1) имеет $s_1 + s_2 + s_0 - 2$, или $s_1 + s_2 + s_0 - 1$, или $s = s_1 + s_2 + s_0$ предельных циклов.

З а м е ч а н и е 2. Если в условии теоремы 3 кривая W не имеет овалов ω_i , окружающих точку A , т. е. $s_1 = 0$ (или овалов ν_j , окружающих точку B , т. е. $s_2 = 0$), то вместо трехсвязной подобласти Ω_{00} будет двусвязная подобласть Ω_{s_2} (Ω_{s_1}), в которой система (1) имеет точно один предельный цикл, окружающий только точку B (или только точку A).

Д о к а з а т е л ь с т в о. Для определенности будем полагать, что в подобласти Ω_{s_2} (Ω_{s_1}) выполняются условия $\Phi > 0$, $\Psi < 0$. Теория Пуанкаре – Бендиксона для системы (1) в двусвязной подобласти Ω_{s_2} (Ω_{s_1}) допускает следующие случаи:

- 1) нет замкнутых траекторий;
- 2) существует замкнутая траектория, окружающая все три точки покоя A , O , B ;
- 3) существует замкнутая траектория, окружающая только точку покоя B (A).

В первом случае обе ω -сепаратрисы седла O должны или приходить в подобласть Ω_{s_2} (Ω_{s_1}) извне при $t \rightarrow +\infty$, или стремиться к неустойчивой особой траектории при $t \rightarrow -\infty$. Существование функции Ψ исключает такую возможность для одной из ω -сепаратрис. Во втором случае две α -сепаратрисы при $t \rightarrow +\infty$ должны или покидать подобласть Ω_{s_2} (Ω_{s_1}) или стремиться к устойчивой особой траектории. Существование функции Ψ делает это невозможным для одной из α -сепаратрис. В третьем случае противоречия нет.

Однако теорема 3 не дает точной оценки числа предельных циклов системы (1), поскольку для выяснения вопроса о существовании или отсутствии предельного цикла во внешней двусвязной подобласти Ω_s нужно провести дополнительные исследования и определить влияние других особых траекторий, расположенных вне области Ω , или построить дополнительную трансверсальную замкнутую кривую, охватывающую внешний овал u_{s_0} . Также дополнительные

исследования нужно провести в трехсвязной подобласти Ω_{00} , чтобы выяснить, какой из случаев – 3 или 7 имеет место в конкретной ситуации.

Рассмотрим теперь в условиях теоремы 3 способ определения точного числа предельных циклов системы (1) в двусвязной подобласти Ω_s , который основан на построении в ней замкнутой трансверсальной кривой, охватывающей внешний овал u_{s_0} , за счет нахождения в области Ω второй функции Дюлака – Черкаса $\tilde{\Psi}(x, y)$.

Т е о р е м а 4. Пусть выполняются условия теоремы 3 и дополнительно для системы (1) в области Ω существует функция Дюлака – Черкаса $\tilde{\Psi}(x, y)$ при $\tilde{k} < 0$ такая, что кривая \tilde{W} состоит из $s_0 + 1$ овала \tilde{y}_l в Ω , окружающих все три точки покоя A, B, O , причем внешний овал \tilde{y}_{s_0+1} окружает внешний овал u_{s_0} кривой W . Тогда система (1) в области Ω имеет точно s предельных циклов, окружающих все три точки покоя A, B, O .

Д о к а з а т е л ь с т в о. Существование функции Дюлака – Черкаса $\Psi(x, y)$, определяющей в области Ω s_0 овалов, окружающих все три точки покоя A, B, O , в силу теоремы 2 доказывает наличие у системы (1) $s_0 - 1$ предельных циклов в кольцеобразных областях Ω_l , $l = 1, \dots, s_0 - 1$, границами которых являются соседние овалы u_l и u_{l+1} , а также дает возможность для существования одного предельного цикла в двусвязной подобласти Ω_s . Существование второй функции Дюлака – Черкаса $\tilde{\Psi}(x, y)$, определяющей в области Ω $s_0 + 1$ овалов, окружающих все три точки покоя A, B, O , в силу теоремы 2 доказывает наличие у системы (1) s_0 предельных циклов в кольцеобразных областях $\tilde{\Omega}_l$, $l = 1, \dots, s_0$, границами которых являются соседние овалы \tilde{y}_l и \tilde{y}_{l+1} кривой \tilde{W} , а также дает возможность для существования одного предельного цикла в подобласти $\tilde{\Omega}_{s+1}$, расположенной между внешним овалом \tilde{y}_{s_0+1} кривой \tilde{W} и границей $\partial\Omega$ области Ω . Одновременное существование функций Ψ и $\tilde{\Psi}$ гарантирует наличие одного предельного цикла в подобласти $\Omega_s \setminus \tilde{\Omega}_{s+1}$ и исключает возможность существования предельного цикла в подобласти $\tilde{\Omega}_{s+1}$. Это доказывает, что система (1) в области Ω имеет ровно s_0 предельных циклов, охватывающих все три точки покоя A, B, O .

3. Построение функции Дюлака – Черкаса. В монографии [6] представлены различные приемы построения функции Дюлака – Черкаса, позволяющей получить оценки числа предельных циклов с помощью применения теорем 1 и 2. В частности, если функцию $\Psi(x, y)$ искать в виде

$$\Psi = \Psi(x, y, C) = \sum_{j=1}^n C_j \Psi_j(x, y), \quad C = (C_1, \dots, C_n), \quad (4)$$

где C_j – вещественные константы, то функция Φ из условия (2) также будет являться линейной комбинацией известных функций $\Phi_j(x, y)$ с теми же коэффициентами

$$\Phi = \Phi(x, y, C) = \sum_{j=1}^n C_j \Phi_j(x, y),$$

положительность которой в ограниченной области Ω при условии $\|C\|^2 = \sum_{j=1}^n C_j^2$ равносильна следующей сеточной задаче линейного программирования:

$$L \rightarrow \max, \sum_{j=1}^n C_j \Phi_j(x_q, y_q) - L \geq 0, |C_j| \leq 1, L \in R \quad (5)$$

на сетке узлов (x_q, y_q) , $q = 1, \dots, N_0$, взятой в области Ω , $N_0 = n_x \cdot n_y$, где n_x, n_y – число узлов сетки вдоль осей Ox и Oy соответственно. Задача (5) является задачей линейного программирования с переменными C_j , $j = \overline{1, n}$, и L . Пусть $C^* = (C_1^*, C_2^*, \dots, C_n^*), L^*$ – решение задачи (5), в котором $L^* > 0$. Выбор чисел n, k и N_0 производится экспериментально и зависит от вида правых частей системы (1), а также от размера области Ω . После решения задачи (5) средствами анализа строго проверяем, что найденная функция Ψ действительно удовлетворяет неравенству (2) в области Ω .

В ограниченной области Ω функцию $\tilde{\Psi}(x, y)$ также можно искать с помощью редукции к сеточной задаче линейного программирования, аналогичной задаче (5):

$$\tilde{L} \rightarrow \max, \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \tilde{C}_j \tilde{\Phi}_j(x_{\tilde{q}}, y_{\tilde{q}}) - \tilde{L} \geq 0, |\tilde{C}_j| \leq 1, \tilde{L} \in R, \tilde{C} = (\tilde{C}_1, \dots, \tilde{C}_{\tilde{n}}) \quad (6)$$

на сетке узлов $(x_{\tilde{q}}, y_{\tilde{q}}), \tilde{q} = 1, \dots, \tilde{N}_0$, взятой в области Ω , где $\tilde{N}_0 = \tilde{n}_x \cdot \tilde{n}_y$, $\tilde{\Phi} = \sum_{j=1}^{\tilde{n}} \tilde{C}_j \tilde{\Phi}_j$.

Функцию Дюлака – Черкаса $\Psi(x, y)$ или $\tilde{\Psi}(x, y)$ для полиномиальных систем (1) удобно искать в виде полинома степени p , где $n = \frac{(p+1)(p+2)}{2}$, в частности

$$\Psi = C_1 + C_2x + C_3y + C_4x^2 + C_5xy + C_6y^2 + \dots + C_ny^p. \quad (7)$$

В случае системы Льенара

$$\frac{dx}{dt} = y, \quad \frac{dy}{dt} = -g(x) - f(x)y, \quad g(0) = 0, \quad (8)$$

функцию Дюлака – Черкаса Ψ удобно строить с помощью метода сведения функции Φ к функции, зависящей только от одной фазовой переменной [6, с. 229]. Для этого функцию Ψ строим в виде полинома степени $n-1$, $n \geq 3$ относительно фазовой переменной y с коэффициентами, зависящими от переменной x :

$$\Psi = \sum_{i=1}^n \Psi_i(x, C) y^{n-i}, \quad (9)$$

где $C = (C_1, \dots, C_n)$ – константы интегрирования, которые появляются при нахождении функций $\Psi_1 = C_1$, $\Psi_2 = (k+n-1)FC_1 + C_2$, $\Psi_i = \int \Psi'_i(x) dx + C_i$, $i = \overline{3, n}$ за счет интегрирования по x следующих дифференциальных уравнений:

$$\Psi'_1 = 0, \quad \Psi'_2 = (k+n-1)fC_1, \quad F(x) = \int_0^x f(u) du, \quad \Psi'_i = (k+n-i+1)f\Psi_{i-1} + (n-i+2)g\Psi_{i-2}, \quad i = \overline{3, n}.$$

Тогда функция Φ имеет вид $\Phi(x, C)$, и выполнить условие (5) удобно за счет решения задачи линейного программирования

$$L \rightarrow \max, \sum_{i=1}^n C_i \Phi_i(x_l) - L \geq 0, \quad |C| \leq 1, \quad (10)$$

где $x_l, l = \overline{1, N_0}$, являются узлами сетки на отрезке $[x_1, x_{N_0}]$, который соответствует полосе $\Omega_x = \{(x, y) : x \in [x_1, x_{N_0}], y \in R\}$ локализации предельных циклов системы (8).

4. Примеры. Покажем теперь практическую эффективность теорем 3 и 4 в некоторых случаях системы Льенара.

Пример 1. Для системы Льенара в первой форме

$$\dot{x} = y, \quad \dot{y} = x(1-x)(1+2x) - 0.1(-2+x+1.2x^2)y, \quad (11)$$

имеющей в конечной части фазовой плоскости три точки покоя: $A(-0.5; 0)$, $B(1; 0)$ – фокусы и $O(0; 0)$ – седло, с помощью метода сведения функции $\Phi(x, y)$ к функции, зависящей только от одной фазовой переменной, и решения сеточной задачи линейного программирования (10) в полосе $\Omega_x = \{(x, y) : x \in [-1.2; 1.7], y \in R\}$ на равномерной сетке с количеством узлов $N_0 = 150$ построена функция Дюлака – Черкаса $\Psi(x, y)$ вида (9) при $n = 8$, $k = -1.5$. Найденное решение задачи (10) имеет вид

$$C^* = (-0.3739, 0.999812, -0.100051, 0.999812, -0.127654, -0.999812, -0.183349, -0.650099).$$

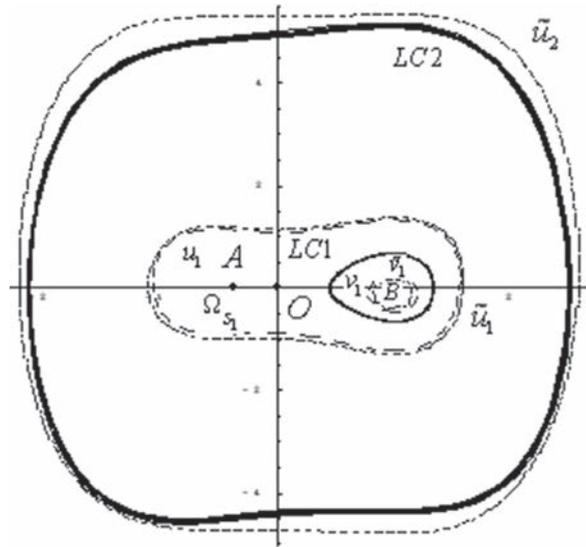


Рис. 4. Расположение овалов кривых W и \tilde{W} , а также предельных циклов системы (11)
 Fig 4. Location of the ovals of the curves W and \tilde{W} , and of the limit cycles of system (11)

При этом в полосе Ω_x выполняется неравенство $\Phi > 0$, и кривая W состоит из двух овалов v_1 и u_1 , окружающих соответственно только точку B и всю группу точек. На рис. 4 эти овалы изображены крупной пунктирной линией. Существование такой функции Ψ означает, что в соответствии с теоремой 3 и замечанием 2 система (11) имеет предельный цикл $LC1$, окружающий только точку B , и может иметь предельный цикл $LC2$, окружающий овал u_1 и вместе с ним все три точки A , B и O . Для проверки существования такого предельного цикла с помощью метода сведения функции $\tilde{\Phi}(x, y)$ к функции, зависящей только от одной фазовой переменной, и решения сеточной задачи линейного программирования (10) в полосе $\tilde{\Omega}_x = \{(x, y) : x \in [-3; 3], y \in R\}$ на равномерной сетке с количеством узлов $N_0 = 150$ построена вторая функция Дюлака – Черкаса $\tilde{\Psi}(x, y)$ вида (9) при $n = 10$, $k = -1.5$. Найденное решение задачи (10) имеет вид

$$\tilde{C}^* = (0.000887, -0.021562, -0.008507, 0.48476, 0.000132, 0.999796, -0.193633, -0.999796, -0.289041, -0.784093).$$

При этом в полосе $\tilde{\Omega}_x$ выполняется неравенство $\tilde{\Phi} > 0$, и кривая \tilde{W} состоит из трех овалов \tilde{v}_1, \tilde{u}_1 и \tilde{u}_2 . Овал \tilde{v}_1 окружает только точку B , а овалы \tilde{u}_1, \tilde{u}_2 – всю группу точек. На рис. 4 эти овалы изображены мелкой пунктирной линией. Таким образом, в соответствии с теоремами 3 и 4 система (11) в полосе $\tilde{\Omega}_x$ имеет точно два предельных цикла: один устойчивый $LC1$, окружающий только точку покоя B , второй неустойчивый $LC2$ – всю группу точек.

Пример 2. Система Лъенара (8) с помощью подстановки $y = u + F(x)$, $F(x) = \int_0^x f(t)dt$ и переобозначения переменной u на y приводится к второй форме

$$\frac{dx}{dt} = y - F(x), \quad \frac{dy}{dt} = -g(x). \tag{12}$$

Для системы Лъенара (12) в виде

$$\dot{x} = y - (x - 0.351667x^3), \quad \dot{y} = x(1 - x^2), \tag{13}$$

имеющей в конечной части фазовой плоскости три точки покоя: $A(-1; -0.648333)$, $B(1; 0.648333)$ – фокусы и $O(0; 0)$ – седло, с помощью решения сеточной задачи линейного программирования (5) в области $\Omega = \{(x, y) : x \in [-1.7; 1.7], y \in [-1.7; 1.7]\}$ при $n = 153$, $k = -1.2$ на равномерной сетке с количеством узлов $N_0 = 4355$ построена функция Дюлака – Черкаса $\Psi(x, y)$ в виде полинома (7) степени $p = 16$. Найденное решение задачи (5) имеет вид

$$\begin{aligned}
 C^* = & (0.838868, -0.001237, 0.000541, 0.096024, -0.171371, -0.062015, \\
 & 0.001073, 0.001087, 0.004712, -0.004594, -0.171371, -0.171371, 0.035799, \\
 & 0.171371, 0.061481, 0.002786, 0.007066, -0.01711, -0.002555, 0.007576, \\
 & 0.002188, 0.076251, -0.099992, -0.171371, 0.171371, 0.171371, 0.171371, \\
 & -0.171371, -0.007323, -0.019457, 0.017525, 0.002791, 0.00486, 0.003473, \\
 & -0.009928, -0.001725, -0.042819, 0.171371, -0.133172, 0.171371, 0.171371, \\
 & 0.035816, -0.171371, -0.152245, -0.078961, 0.007375, 0.020558, -0.012407, \\
 & 0.005082, -0.002054, -0.011076, -0.001945, 0.009681, -0.000472, 0.002453, \\
 & 0.117375, 0.171371, 0.171371, -0.142911, -0.171371, -0.171371, -0.112638, \\
 & -0.171371, 0.152204, 0.171371, 0.171371, -0.003945, -0.010246, 0.006868, \\
 & -0.006811, -0.002349, 0.005683, 0.004411, -0.002974, 0.003889, -0.008573, \\
 & 0.003169, -0.001614, -0.104607, -0.171371, -0.011977, -0.136675, 0.092708, \\
 & -0.0358, 0.171371, 0.171371, 0.171371, -0.114082, -0.085167, -0.073482, \\
 & -0.105678, 0.001081, 0.002329, -0.002072, 0.002619, 0.000955, -0.000817, \\
 & -0.000935, 0.000434, -0.002821, 0.002986, -0.001665, 0.002552, -0.001183, \\
 & 0.000472, 0.035751, 0.040013, -0.020143, 0.093655, -0.043404, 0.060341, \\
 & -0.079686, 0.028167, -0.122805, -0.007541, -0.062467, 0.086517, 0.020745, \\
 & 0.015762, 0.028252, -0.000117, -0.000189, 0.000233, -0.000313, -0.000081, \\
 & 0.000018, 0.000032, -0.000109, 0.000443, -0.000304, 0.00038, -0.000462, \\
 & 0.000237, -0.000237, 0.000133, -0.000049, -0.004282, -0.00196, 0.003841, \\
 & -0.013182, 0.00725, -0.010039, 0.013859, -0.015645, 0.018638, -0.015645, \\
 & 0.018638, -0.004248, 0.023779, -0.006538, 0.003805, -0.013958, 0.000375, \\
 & -0.001353, -0.003011).
 \end{aligned}$$

При этом в области Ω выполняется неравенство $\Phi > 0$, и кривая W состоит из трех овалов v_1, ω_1 и u_1 , окружающих соответственно только точку A , только точку B и все три точки. На рис. 5 эти овалы изображены мелкой пунктирной линией. Существование такой функции Ψ означает, что в соответствии с теоремой 3 система (13) может иметь два предельных цикла, окружающих овалы v_1, ω_1 , и может иметь предельный цикл, окружающий овал u_1 .

Затем для системы (13), следуя работе И. Н. Сидоренко¹, с помощью метода сведения функции $\tilde{\Phi}(x, y)$ к функции, зависящей только от одной фазовой переменной, и решения сеточной задачи линейного программирования (10) в полосе $\tilde{\Omega}_x = \{(x, y) : x \in [-2.6; 2.6], y \in R\}$ на равномерной сетке с количеством узлов $N_0 = 500$ построена функция Дюлака – Черкаса $\tilde{\Psi}(x, y)$ вида (9) при $n = 9$, $k = -1$. Найденное решение задачи (10) имеет вид

$$\tilde{C}^* = (0.459621, 0, -0.999774, 0, -0.10952, 0, -0.538428, 0, 0.0190266).$$

При этом в полосе $\tilde{\Omega}_x$ выполняется неравенство $\tilde{\Phi} > 0$, и кривая \tilde{W} состоит из четырех овалов $\tilde{\omega}_1, \tilde{v}_1, \tilde{u}_1$ и \tilde{u}_2 . Овал $\tilde{\omega}_1$ окружает только точку A , овал \tilde{v}_1 – только точку B , а овалы \tilde{u}_1, \tilde{u}_2 – всю группу точек. На рис. 5 эти овалы изображены крупной пунктирной линией. Таким образом, в соответствии с теоремами 3 и 4, а также на основании результатов исследования поведения сепаратрис седла O в подобласти Ω_{00} приходим к выводу, что система (13) в полосе $\tilde{\Omega}_x$ имеет точно три предельных цикла: один устойчивый $LC1$, окружающий только точку покоя A , второй устойчивый $LC2$, окружающий только точку покоя B , третий неустойчивый $LC3$, окружающий всю

¹ Сидоренко И. Н. Предельные циклы «нормального размера» систем Лъенара, квадратичных и кубических систем: дис. ... канд. физ.-мат. наук : 01.01.02. Могилев, 2010. – 100 л.

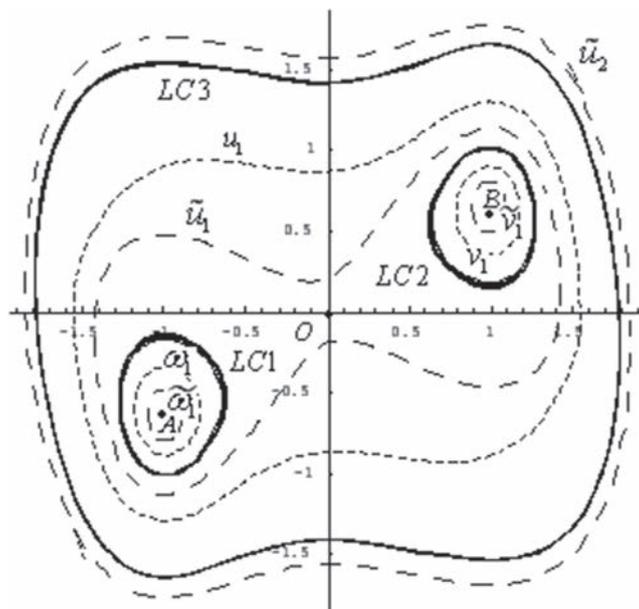


Рис. 5. Расположение овалов кривых W и \tilde{W} , а также предельных циклов системы (13)

Fig 5. Location of ovals of the curves W and \tilde{W} , and of the limit cycles of system (13)

группу точек. При этом движение изображающей точки на всех циклах при $t \rightarrow +\infty$ происходит по часовой стрелке.

Заключение. Таким образом, в настоящей работе предложен способ для точной нелокальной оценки числа предельных циклов, основанный на последовательном построении функции Дюлака – Черкаса. Практическая эффективность разработанного подхода продемонстрирована на примере полиномиальных систем Льенара.

Список использованных источников

1. Ilyashenko, Y. Centennial history of Hilbert's 16th problem / Y. Ilyashenko // Bull. Amer. Math. Soc. – 2002. – Vol. 39. – P. 301–355.
2. Качественная теория динамических систем второго порядка / А. А. Андронов [и др.]. – М.: Наука. 1966. – 568 с.
3. Ye, Y. Theory of limit cycles / Y. Ye // Transl. of AMS Monographs, Providence, RI, 66. – 1986. – P. 435.
4. Qualitative theory of differential equations / Z. Zhang [et al.] // Translations of Mathematical monographs. Providence, RI, American Mathematical Society. – 1992. – Vol. 101. – P. 461.
5. Черкас, Л. А. Функция Дюлака полиномиальных автономных систем на плоскости / Л. А. Черкас // Дифференц. уравнения. – 1997. – Т. 33, № 5. – С. 689–699.
6. Черкас, Л. А. Конструктивные методы исследования предельных циклов автономных систем второго порядка (численно-алгебраический подход) / Л. А. Черкас, А. А. Гринь, В. И. Булгаков. – Гродно, 2013. – 489 с.
7. Черкас, Л. А. О функции Дюлака для системы Куклеса / Л. А. Черкас, А. А. Гринь // Дифференц. уравнения. – 2010. – Т. 46, № 6. – С. 811–819.
8. Cherkas, L. A. Dulac-Cherkas functions for generalized Lienard systems / L. A. Cherkas, A. A. Grin, K. R. Schneider [Electronic resource] // Electron. J. Qualitative Theory of Differential Equations. – 2011. – N 35. – P. 1–23. – Mode of access: <http://www.math.u-szeged.hu/ejqtde/>.
9. Кузьмич, А. В. Выделение класса обобщенных систем Куклеса с единственным предельным циклом / А. В. Кузьмич // Вестн. ГрГУ им. Янки Купалы. Сер 2, Математика. Физика. Информатика, вычислительная техника и управление. – 2015. – № 3 (199). – С.18–26.

References

1. Ilyashenko Y. Centennial history of Hilbert's 16th problem. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 2002, vol. 39, pp. 301–355. doi: 10.1090/s0273-0979-02-00946-1.
2. Andronov A.A., Leontovich E.A., Gordon I.I., Majer A.G. *Qualitative theory of second order dynamic systems*. Moscow, Nauka Publ., 1966. 568 p. (in Russian)
3. Ye Y., Cai S.L., Chen L.S., Huang K.C., Luo D.J., Ma Z.E., Yang X.A. *Theory of limit cycles, Translations of Mathematical Monographs*, vol. 66. Providence, American Mathematical society, 1986. 435 p.
4. Zhang Z., Ding T., Huang W., Dong Z. *Qualitative theory of differential equations. Translations of Mathematical monographs, vol.101*. Providence, American Mathematical Society, 1992. 461 p.

5. Cherkas L.A. Dulac function for polynomial autonomous system in plane. *Differential equations*, 1997, vol. 33, no. 5, pp. 692–701.
6. Cherkas L.A., Grin A.A., Bulgakov V.I. *Constructive methods of investigation of limit cycles of second order autonomous systems (numerical-algebraic approach)*. Grodno, 2013. 489 p. (in Russian)
7. Cherkas L.A., Grin A.A. On a Dulac function for the Kukles system. *Differentsial'nye uravneniia - Differential equations*, 2010, vol. 46, no. 6, pp. 818–826. doi:10.1134/S0012266110060066.
8. Cherkas, L.A., Grin, A.A., Schneider, K.R. Dulac-Cherkas functions for generalized Lienard systems. *Electronic Journal of Qualitative Theory of Differential Equations*, 2011, no. 35. Available at: <http://www.math.u-szeged.hu/ejqtde/>.
9. Kuzmich A.V. Emphasizing of a class of Kukles generalized systems with the unique limit cycle. *Vestnik GrGU im. Ianki Kupaly. Ser. 2. Matematika. Fizika. Informatika, vychislitel'naya tekhnika i upravlenie* [Vesnik of Yanka Kupala State University of Grodno. Series 2. Mathematics. Physics. Informatics, Computer Technology and its Control], 2015, no. 3 (199), pp.18–26. (in Russian)

Информация об авторах

Гринь Александр Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой математического анализа, дифференциальных уравнений и алгебры факультета математики и информатики, Гродненский государственный университет им. Янки Купалы (ул. Ожешко, 22, 230020, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: grin@grsu.by

Кузьмич Андрей Викторович – старший преподаватель кафедры фундаментальной и прикладной математики факультета математики и информатики, Гродненский государственный университет им. Янки Купалы (ул. Ожешко, 22, 230020, г. Гродно, Республика Беларусь). E-mail: andrei-ivn@mail.ru

Для цитирования

Гринь, А. А. Точные оценки числа предельных циклов автономных систем с тремя точками покоя на плоскости / А. А. Гринь, А. В. Кузьмич // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 7–17.

Information about the authors

Hryn Aliaksandr Aliaksandrovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Head of the Department of Mathematical Analysis, Differential Equations and Algebra, Faculty of Mathematics and Informatics, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Ozheshko Str., 230020, Grodno, Republic of Belarus). E-mail: grin@grsu.by

Kuzmich Andrei Victorovich – Senior lecturer, Department of Fundamental and Applied Mathematics, Faculty of Mathematics and Informatics, Yanka Kupala State University of Grodno (22, Ozheshko Str., 230020, Grodno, Republic of Belarus). E-mail: andrei-ivn@mail.ru

For citation

Grin A.A., Kuzmich A.V. Precise estimations of limit cycles number of autonomous systems with three equilibrium points in the plane. *Vestsi Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 7–17. (in Russian)

Н. Н. Воробьев, А. Р. Кузнецова

*Витебский государственный университет им. П. М. Машерова, Витебск, Беларусь***ОБ ИНДУКТИВНЫХ РЕШЕТКАХ НАСЫЩЕННЫХ ФОРМАЦИЙ**

Все рассматриваемые группы конечны. Символом $F_p(G)$ обозначают наибольшую нормальную p -нильпотентную подгруппу группы G , а символом $\pi(G)$ – множество всех различных простых делителей порядка группы G . Функции $f: \mathbb{P} \rightarrow \{\text{формации групп}\}$ сопоставляют класс групп $LF(f) = (G \mid G/F_p(G) \in f(p) \text{ для всех } p \in \pi(G))$. Если формация \mathfrak{F} такова, что $\mathfrak{F} = LF(f)$ для некоторой функции f , то \mathfrak{F} называют насыщенной формацией с локальным спутником f . Пусть \mathfrak{F} – насыщенная формация. Символом $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ обозначают полную решетку всех насыщенных формаций, заключенных между $\mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ и \mathfrak{F} , где \mathfrak{N} – класс всех nilпотентных групп. Для произвольной полной решетки формаций Θ символом Θ' обозначается полная решетка всех таких формаций, которые обладают локальным Θ -значным спутником. Спутник f называется Θ -значным, если все его значения принадлежат Θ .

Пусть Θ – полная решетка формаций. Тогда верхняя грань произвольной совокупности $\{\mathfrak{F}_i \mid i \in I\}$ элементов из Θ' обозначается через $\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I)$. Решетка Θ' называется индуктивной (см. Скиба А. Н. Алгебра формаций. Минск: Беларус. навука, 1997), если для любого набора $\{\mathfrak{F}_i = LF(f_i) \mid i \in I\}$ формаций $\mathfrak{F}_i \in \Theta'$ и для всякого такого набора $\{f_i \mid i \in I\}$ Θ -значных спутников f_i , где f_i – некоторый внутренний спутник формации \mathfrak{F}_i , имеет место $\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I) = LF(\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I))$, где символ $\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I)$ обозначает такой спутник f , что $f(p)$ является верхней гранью для $\{f_i(p) \mid i \in I\}$ в Θ , если $\bigcup_{i \in I} f_i(p) \neq \emptyset$, и $f(p) = \emptyset$ в противном случае. В настоящей работе доказана следующая

Т е о р е м а. Пусть \mathfrak{F} – насыщенная формация. Тогда решетка $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ индуктивна.

Ключевые слова: формация, полная решетка формаций, решетка насыщенных формаций, индуктивная решетка формаций.

N. N. Vorob'ev, A. R. Kuznetsova

*Vitebsk State University named after P. M. Masherov, Vitebsk, Belarus***ON INDUCTIVE LATTICES OF SATURATED FORMATIONS**

All groups considered are finite. The symbol $F_p(G)$ denotes the p -nilpotent radical of a group G ; $\pi(G)$ is the set of primes dividing the order of G . Let f be a function of the form

$$f: \mathbb{P} \rightarrow \{\text{formations of groups}\}. \quad (*)$$

We consider the class of groups $LF(f) = (G \mid G/F_p(G) \in f(p) \text{ for all } p \in \pi(G))$. If \mathfrak{F} is a formation such that $\mathfrak{F} = LF(f)$ for a function f of the form $(*)$, then \mathfrak{F} is said to be saturated and f is said to be a local satellite of \mathfrak{F} . Let \mathfrak{F} be a saturated formation. We write $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ to denote the lattice of all saturated formations lying between \mathfrak{F} and $\mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$, where \mathfrak{N} is the class of all nilpotent groups.

Let Θ be a complete lattice of formations. Then we denote by Θ' the set of all formations having a local Θ -valued satellite. A satellite f is called Θ -valued if all values of f belong to Θ . Let $\mathfrak{X} \subseteq \mathfrak{F} \in \Theta$ be a collection of group. We write $\Theta\text{form}\mathfrak{X}$ to denote the intersection of all formations of Θ containing all groups of \mathfrak{X} . Let $\{\mathfrak{F}_i \mid i \in I\}$ be an arbitrary collection of formations in Θ . We denote

$$\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I) = \Theta\text{form}\left(\bigcup_{i \in I} \mathfrak{F}_i\right).$$

Let $\{f_i \mid i \in I\}$ be a collection of Θ -valued satellites. Then $\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I)$ denotes the satellite f such that

$$f(p) = \Theta\text{form}\left(\bigcup_{i \in I} f_i(p)\right)$$

for every $p \in \mathbb{P}$.

A complete lattice Θ' is called inductive (see Skiba A. N. Algebra formacij [Algebra of Formations]. Minsk, Belaruskaja navuka Publ., 1997) if for any collection $\{\mathfrak{F}_i = LF(f_i) \mid i \in I\}$, where f_i is an integrated satellite of $\mathfrak{F}_i \in \Theta'$, the following equality holds: $\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I) = LF(\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I))$. In this paper, we prove the following

T h e o r e m. Let \mathfrak{F} be a saturated formation. Then the lattice $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ is inductive.

Keywords: formation, complete lattice of formations, lattice of saturated formations, inductive lattice of formations.

Все рассматриваемые группы конечны. Мы будем рассматривать терминологию из [1–3]. Символами $F_p(G)$ и $O_p(G)$ обозначают соответственно наибольшую нормальную p -нильпотентную подгруппу группы G и наибольшую нормальную p -подгруппу группы G , а символом \mathfrak{N} – класс всех nilпотентных групп. Напомним, что формацией называется класс групп, который замкнут относительно взятия гомоморфных образов и подпрямых произведений. Пусть f – произвольная функция вида

$$f: \mathbb{P} \rightarrow \{\text{формации групп}\}. \quad (1)$$

Следуя [1], сопоставим функции f класс групп

$$LF(f) = \{G \mid G / F_p(G) \in f(p) \text{ для всех } p \in \pi(G)\}.$$

Если формация \mathfrak{F} такова, что $\mathfrak{F} = LF(f)$ для некоторой функции f вида (1), то \mathfrak{F} называют насыщенной формацией с локальным спутником f [1].

Совокупность формаций Θ называется полной решеткой формаций [2], если пересечение любой совокупности формаций из Θ снова принадлежит Θ и во множестве Θ имеется такая формация \mathfrak{F} , что $\mathfrak{H} \subseteq \mathfrak{F}$ для любой формации $\mathfrak{H} \in \Theta$. Пусть \mathfrak{F} – насыщенная формация. Заметим, что относительно включения \subseteq множество всех насыщенных формаций, заключенных между $\mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ и \mathfrak{F} , образуют полную решетку, которую обозначают $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$.

Для произвольной полной решетки формаций Θ символом Θ' обозначается совокупность всех таких формаций, которые обладают локальным Θ -значным спутником, т. е. таким локальным спутником, все непустые значения которого принадлежат Θ . Нетрудно убедиться (см. подробнее [2, гл. 4]), что Θ' – полная решетка, и она наследует многие свойства решетки Θ .

Пусть Θ – полная решетка формаций. Тогда верхняя грань произвольной совокупности $\{\mathfrak{F}_i \mid i \in I\}$ элементов из Θ' обозначается (см. [2]) через $\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I)$. Решетка Θ' называется индуктивной [2], если для любого набора $\{\mathfrak{F}_i = LF(f_i) \mid i \in I\}$ формаций $\mathfrak{F}_i \in \Theta'$ и для всякого такого набора $\{f_i \mid i \in I\}$ Θ -значных спутников f_i , где f_i – некоторый внутренний спутник формации \mathfrak{F}_i , имеет место $\vee_{\Theta'}(\mathfrak{F}_i \mid i \in I) = LF(\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I))$, где символ $\vee_{\Theta}(f_i \mid i \in I)$ обозначает такой спутник f , что $f(p)$ является верхней гранью для $\{f_i(p) \mid i \in I\}$ в Θ , если $\bigcup_{i \in I} f_i(p) \neq \emptyset$, и $f(p) = \emptyset$ в противном случае. Заметим, что индуктивность решетки Θ по существу означает, что исследование операции $\vee_{\Theta'}$ на множестве Θ' можно редуцировать к исследованию более простой операции \vee_{Θ} на множестве Θ .

Впервые индуктивные решетки начал изучать А. Н. Скиба (см. [2, гл. 4]), который доказал индуктивность решетки всех функторно замкнутых n -кратно насыщенных формаций [2, теорема 4.1.1]. В работе [4] была установлена индуктивность решетки всех функторно замкнутых тотально насыщенных формаций, что нашло приложение в работах В. Г. Сафонова [5, 6] при доказательстве модулярности и дистрибутивности решетки всех тотально насыщенных формаций. Впоследствии Н. Н. Воробьевым и А. А. Царевым [7, 8] и, независимо, П. А. Жизневским [9] доказана индуктивность решетки всех функторно замкнутых n -кратно ω -композиционных формаций. Этот результат позволил установить модулярность такой решетки [7, 9], а также сыграл ключевую роль в исследовании тождеств решеток формаций [10]. Отметим, наконец, что свойство индуктивности решетки всех разрешимых тотально насыщенных формаций применялось С. Райфершейд в работе [11, предложение 3.3] при доказательстве дистрибутивности этой решетки.

Основным результатом данной работы является следующая

Т е о р е м а. Пусть \mathfrak{F} – насыщенная формация. Тогда решетка $\mathfrak{F} / \mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ индуктивна.

Напомним несколько известных утверждений, которые потребуются для доказательства основного результата.

Л е м м а 1 [12, лемма 2]. Пусть $\mathfrak{F} = \bigcap_{i \in I} \mathfrak{F}_i$, где $\mathfrak{F}_i = LF(f_i)$. Тогда $\mathfrak{F} = LF(f)$, где $f = \bigcap_{i \in I} f_i$.

Пусть $\{f_i \mid i \in I\}$ – набор всех спутников формации \mathfrak{F} . Ввиду леммы 1, $f = \bigcap_{i \in I} f_i$ – минимальный спутник формации \mathfrak{F} .

Пусть \mathfrak{X} – произвольная совокупность групп. Через $\text{form}\mathfrak{X}$ обозначается наименьшая формация, содержащая \mathfrak{X} , а через $\text{lform}\mathfrak{X}$ – наименьшая насыщенная формация, содержащая \mathfrak{X} .

Следующая лемма дает способ построения минимального спутника формации $\mathfrak{F} = \text{lform}\mathfrak{X}$.

Лемма 2 [2, теорема 1.1.5]. Пусть \mathfrak{X} – непустая совокупность групп, $\mathfrak{F} = \text{lform}\mathfrak{X}$ и f – минимальный локальный спутник формации \mathfrak{F} . Тогда справедливы следующие утверждения:

- 1) $\pi(\mathfrak{X}) = \pi(\mathfrak{F})$;
- 2) $f(p) = \text{form}(G/F_p(G) \mid G \in \mathfrak{X})$ для всех $p \in \mathbb{P}$;
- 3) если $\mathfrak{F} = \text{LF}(h)$, то для любого $p \in \pi(\mathfrak{F})$ имеет место

$$f(p) = \text{form}(A \mid A \in h(p) \cap \mathfrak{F}, O_p(A) = 1).$$

Напомним, что полуформацией называется класс групп, замкнутый относительно взятия гомоморфных образов. Неединичная группа G называется монолитической, если в ней имеется лишь одна минимальная нормальная подгруппа (монолит группы G).

Лемма 3 [2, лемма 2.1.6]. Пусть A – монолитическая группа с неабелевым монолитом, \mathfrak{M} – некоторая полуформация и $A \in \text{form}\mathfrak{M}$. Тогда $A \in \mathfrak{M}$.

Лемма 4 [2, лемма 4.1.5]. Пусть \mathfrak{M} – полуформация и $A \in \text{form}\mathfrak{M}$. Тогда, если $O_p(A) = 1$, то $A \in \text{form}\mathfrak{M}_1$, где $\mathfrak{M}_1 = \{G/O_p(G) \mid G \in \mathfrak{M}\}$.

Лемма 5 [2, лемма 1.3.6]. Если $\mathfrak{F} = \text{LF}(f)$ и $G/O_p(G) \in f(p) \cap \mathfrak{F}$ для некоторого $p \in \pi(G)$, то $G \in \mathfrak{F}$.

Доказательство теоремы. Пусть $\{\mathfrak{F}_i \mid i \in I\}$ – произвольный набор насыщенных формаций, заключенных между $\mathfrak{F} \cap \mathfrak{N}$ и \mathfrak{F} . И пусть f_i – некоторый внутренний локальный спутник формации \mathfrak{F}_i . Пусть

$$\mathfrak{F} = \vee_i (\mathfrak{F}_i \mid i \in I), \mathfrak{M} = \text{LF}(\vee_i (f_i \mid i \in I))$$

и h_i – минимальный локальный спутник формации \mathfrak{F}_i .

Покажем прежде, что $h = \vee (h_i \mid i \in I)$ – минимальный локальный спутник формации \mathfrak{F} . Пусть

$$\pi = \pi\left(\bigcup_{i \in I} \mathfrak{F}_i\right) = \bigcup_{i \in I} \pi(\mathfrak{F}_i) = \pi(\mathfrak{F}).$$

И пусть t – минимальный локальный спутник формации \mathfrak{F} . Тогда, если $p \in \mathbb{P} \setminus \pi$, то для любого $i \in I$ имеет место $h_i(p) = \emptyset$. Значит, $h(p) = \emptyset$. Понятно также, что $t(p) = \emptyset$. Пусть $p \in \pi$. Тогда найдется такое $i \in I$, что $h_i(p) \neq \emptyset$. Значит, согласно лемме 2 имеет место

$$\begin{aligned} t(p) &= \text{form}\left(G/F_p(G) \mid G \in \bigcup_{i \in I} \mathfrak{F}_i\right) = \\ &= \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} \text{form}(G/F_p(G) \mid G \in \mathfrak{F}_i)\right) = \\ &= \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} h_i(p)\right) = (\vee (h_i \mid i \in I))(p) = h(p). \end{aligned}$$

Итак, h – минимальный локальный спутник формации \mathfrak{F} .

Покажем, что $h \leq f = \vee (f_i \mid i \in I)$. Поскольку $h_i \leq f_i$, то для всех $p \in \mathbb{P}$ имеет место включение $h_i(p) \subseteq f_i(p)$. Значит,

$$\bigcup_{i \in I} h_i(p) \subseteq \bigcup_{i \in I} f_i(p) \subseteq \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} f_i(p)\right).$$

Следовательно,

$$\text{form}\left(\bigcup_{i \in I} h_i(p)\right) \subseteq \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} f_i(p)\right) = \text{form}\left(\text{form}\left(\bigcup_{i \in I} f_i(p)\right)\right).$$

Таким образом, $h \leq f$.

Установим, что $\mathfrak{F} \subseteq \mathfrak{M}$. Пусть $G \in \mathfrak{F}$. Значит,

$$G/F_p(G) \in h(p) = \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} h_i(p)\right) \subseteq \text{form}\left(\bigcup_{i \in I} f_i(p)\right) = f(p),$$

где $p \in \pi(G)$. Поэтому $G \in \mathfrak{M}$. Следовательно, $\mathfrak{F} \subseteq \mathfrak{M}$.

Предположим, что обратное включение неверно. Пусть G – группа минимального порядка из $\mathfrak{M} \setminus \mathfrak{F}$. Обозначим через R монолит группы G . Тогда $R = G^{\mathfrak{S}}$ и $R \not\subseteq \Phi(G)$. Пусть $p \in \pi(R)$.

Предположим, что R – неабелева группа. Значит, $R \not\subseteq C_G(R)$. Поэтому $C_G(R) = 1$. Следовательно, $F_p(G) = 1$. Значит,

$$G \cong G / F_p(G) \in (\vee(f_i | i \in I))(p) = \vee(f_i(p) | i \in I) = \text{form} \left(\bigcup_{i \in I} f_i(p) \right).$$

Ввиду леммы 3

$$G \in \bigcup_{i \in I} f_i(p) \subseteq \bigcup_{i \in I} \mathfrak{F}_i \subseteq \mathfrak{F}.$$

Противоречие. Следовательно, R – p -группа. Покажем теперь, что $R = C_G(R) = O_p(G) = F_p(G)$. Действительно, так как $R \not\subseteq \Phi(G)$, то в группе G найдется такая максимальная подгруппа M , что $R \not\subseteq M$. Пусть $C = C_G(R)$. Тогда $C = C \cap RM = R(M \cap C)$. Очевидно, что $M \cap C$ – нормальная подгруппа группы G . Следовательно, ввиду монолитичности последней, $M \cap C = 1$. Таким образом, $C = R$. Последнее означает, что $R = C_G(R) = O_p(G) = F_p(G)$.

Согласно предположению,

$$G \in \mathfrak{M} = LF(\vee(f_i | i \in I)).$$

Значит,

$$G / F_p(G) = G / R \in \text{form} \left(\bigcup_{i \in I} f_i(p) \right).$$

Поскольку при этом имеет место $O_p(G / O_p(G)) = O_p(G / R) = 1$, то согласно лемме 2 и лемме 4

$$\begin{aligned} G / O_p(G) &= G / R \in \text{form} \left(A / O_p(A) \mid A \in \bigcup_{i \in I} f_i(p) \right) = \\ &= \text{form} \left(\bigcup_{i \in I} \text{form}(A / O_p(A) \mid A \in f_i(p)) \right) = \\ &= \text{form} \left(\bigcup_{i \in I} h_i(p) \right) = (\vee(h_i | i \in I))(p) = h(p). \end{aligned}$$

Значит, ввиду леммы 5, имеем $G \in \mathfrak{F}$.

Полученное противоречие показывает, что $\mathfrak{M} \subseteq \mathfrak{F}$. Следовательно, $\mathfrak{F} = \mathfrak{M}$. Теорема доказана.

Благодарности

Авторы выражают глубокую признательность рецензенту за полезные замечания, способствующие улучшению качества статьи. Работа выполнена при финансовой поддержке Государственной программы научных исследований «Конвергенция-2020» (№ 20160350), Республика Беларусь.

Acknowledgements

The author is very grateful to the referee for helpful comments. The author's research was supported by the State Program of Research "Konvergentsiya-2020", (no. 20160350), Republic of Belarus.

Список использованных источников

1. Шеметков, Л. А. Формации алгебраических систем / Л. А. Шеметков, А. Н. Скиба. – М.: Наука, 1989. – 256 с.
2. Скиба, А. Н. Алгебра формаций / А. Н. Скиба. – Минск: Беларус. навука, 1997. – 240 с.
3. Воробьев, Н. Н. Алгебра классов конечных групп / Н. Н. Воробьев. – Витебск: ВГУ им. П. М. Машерова, 2012. – 322 с.
4. Воробьев, Н. Н. Об индуктивных решетках формаций и классов Фиттинга / Н. Н. Воробьев // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2000. – Т. 44, № 3. – С. 21–24.
5. Safonov, V. G. On modularity of the lattice of totally saturated formations of finite groups / V. G. Safonov // Comm. Algebra. – 2007. – Vol. 35, N 11. – P. 3495–3502.
6. Safonov, V. G. On a question of the theory of totally saturated formations of finite groups / V. G. Safonov // Algebra Colloquium. – 2008. – Vol. 15, N 1. – P. 119–128.
7. Воробьев, Н. Н. О модулярности решетки τ -замкнутых n -кратно ω -композиционных формаций / Н. Н. Воробьев, А. А. Царев // Укр. мат. журн. – 2010. – Т. 62, № 4. – С. 453–463.

8. Vorob'ev, N. N. On a question of the theory of partially composition formations / N. N. Vorob'ev, A. A. Tsarev // *Algebra Colloquium*. – 2014. – Vol. 21, N 3. – P. 437–447.
9. Жизневский, П. А. О модулярности и индуктивности решетки всех τ -замкнутых n -кратно ω -композиционных формаций конечных групп / П. А. Жизневский // *Изв. Гомел. гос. ун-та им. Ф. Скорины*. – 2010. – № 1 (58). – С. 185–191.
10. Воробьев, Н. Н. Тождества решеток частично композиционных формаций / Н. Н. Воробьев, А. Н. Скиба, А. А. Царев // *Сиб. мат. журн.* – 2011. – Т. 52, № 5. – С. 1011–1024.
11. Reifferscheid, S. A note on subgroup-closed Fitting classes of finite soluble groups / S. Reifferscheid // *J. Group Theory*. – 2003. – Vol. 6, N 3. – P. 331–345.
12. Скиба, А. Н. Кратно ω -локальные формации и классы Фиттинга конечных групп / А. Н. Скиба, Л. А. Шеметков // *Мат. тр.* – 1999. – Т. 2, № 2. – С. 114–147.

References

1. Shemetkov L.A., Skiba A.N. *Formations of algebraic systems*. Moscow, Nauka, 1989. 256 p. (in Russian)
2. Skiba A.N. *Algebra of formations*. Minsk, Belaruskaya navuka, 1997. 240 p. (in Russian)
3. Vorob'ev N.N. *Algebra of classes of finite groups*. Vitebsk, Vitebsk University Press, 2012. 322 p. (in Russian)
4. Vorob'ev N.N. On inductive lattices of formations and Fitting classes. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2000, vol. 44, no. 3, pp. 21–24. (in Russian)
5. Safonov V.G. On modularity of the lattice of totally saturated formations of finite groups. *Communications in Algebra*, 2007, vol. 35, no. 11, pp. 3495–3502. doi: 10.1080/00927870701509354.
6. Safonov V.G. On a question of the theory of totally saturated formations of finite groups. *Algebra Colloquium*, 2008, vol. 15, no. 1, pp. 119–128. doi: 10.1142/S1005386708000126.
7. Vorob'ev N. N., Tsarev A.A. On the modularity of a lattice of τ -closed n -multiply ω -composite formations. *Ukrainian Mathematical Journal*, 2010, vol. 62, no. 4, pp. 518–529. doi:10.1007/s11253-010-0368-9.
8. Vorob'ev N.N., Tsarev A.A. On a question of the theory of partially composition formations. *Algebra Colloquium*, 2014, vol. 21, no. 3, pp. 437–447. doi: 10.1142/S1005386714000388.
9. Zhiznevskii P.A. On modular and inductive lattices of formations of finite groups. *Izvestiia Gomel'skogo gosudarstvennogo universiteta imeni F. Skoriny* [Proceedings of Francisk Scorina Gomel State University], 2010, no. 1 (58), pp. 185–191. (in Russian)
10. Vorob'ev N.N., Skiba A.N., Tsarev A.A. Laws of the lattices of partially composition formations. *Siberian Mathematical Journal*, 2011, vol. 52, no. 5, pp. 802–812. doi: 10.1134/S0037446611050053.
11. Reifferscheid S. A note on subgroup-closed Fitting classes of finite soluble groups. *Journal of Group Theory*, 2003, vol. 6, no. 3, pp. 331–345. doi: 10.1515/jgth.2003.023.
12. Skiba A.N., Shemetkov L.A. Multiply ω -local Formations and Fitting classes of finite groups. *Siberian Advances in Mathematics*, 2000, vol. 10, no. 2, pp. 112–141.

Информация об авторах

Воробьев Николай Николаевич – доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры алгебры и методики преподавания математики, Витебский государственный университет им. П. М. Машерова (Московский проспект, 33, 210038, г. Витебск, Республика Беларусь). E-mail: vornic2001@mail.ru

Кузнецова Анна Руслановна – аспирант, Витебский государственный университет им. П. М. Машерова» (Московский проспект, 33, 210038, г. Витебск, Республика Беларусь). E-mail: anyakuznetsova@gmail.com

Для цитирования

Воробьев, Н. Н. Об индуктивных решетках насыщенных формаций / Н. Н. Воробьев, А. Р. Кузнецова // *Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук.* – 2016. – № 4. – С. 18–22.

Information about the authors

Vorob'ev Nikolay Nikolayevich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Professor at the Department of Algebra and Didactics, Vitebsk State University named after P. M. Masherov (33, Moscow Ave., 210038, Vitebsk, Republic of Belarus). E-mail: vornic2001@mail.ru

Kuznetsova Anna Ruslanovna – Postgraduate, Vitebsk State University named after P. M. Masherov (33, Moscow Ave., 210038, Vitebsk, Republic of Belarus). E-mail: anyakuznetsova@gmail.com

For citation

Vorob'ev N.N., Kuznetsova A.R. Inductive lattices of saturated formations. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 18–22. (in Russian)

В. С. Муха

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

СИММЕТРИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ВЕКТОРНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ ДАННЫХ ЛИНЕЙНЫМИ МНОГООБРАЗИЯМИ

Рассматривается задача линейной аппроксимации векторных статистических данных. Как известно, классическая линейная функция регрессии минимизирует сумму квадратов вертикальных расстояний от системы точек до аппроксимирующей плоскости. В данной статье рассматривается иной подход к аппроксимации, когда минимизируется сумма квадратов перпендикулярных расстояний от системы точек до плоскости. Такая аппроксимация названа симметричной. Получены формулы аппроксимирующих линейных многообразий в параметрической форме. Решение задачи выполнено в векторно-матричной форме. Приведены численные примеры и их графические иллюстрации в сравнении с известными результатами из литературы и классического линейного регрессионного анализа.

Ключевые слова: аппроксимация, векторные статистические данные, линейные многообразия, линейный регрессионный анализ, компьютерный анализ данных.

V. S. Mukha

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

SYMMETRIC APPROXIMATION OF VECTOR STATISTICAL DATA BY LINEAR VARIETIES

The problem of the approximation of vector statistical data is considered. As it is known the classical linear regression function minimizes the sum of squares of the vertical distances from the system of points to the approximating plane. The problem in this case consists of choosing the parameters c_0, c_1, \dots, c_{m-1} of linear function $x_m = c_0 + c_1x_1 + \dots + c_{m-1}x_{m-1}$ from the condition

$$\sum_{i=1}^n (x_{m,i} - c_0 - c_1x_{1,i} - \dots - c_{m-1}x_{m-1,i})^2 \rightarrow \min_{c_0, c_1, \dots, c_{m-1}},$$

where $x_{m,i}, i = \overline{1, n}$, are the observations of endogenous component ξ_m of random vector $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_m)$ and n is the size of the sample. In this article, another approach to the approximation is considered when the sum of squares of the perpendicular distances from the system of points $X_i = (x_{1,i}, \dots, x_{m,i}) \in E^m, i = \overline{1, n}$, to the plane $x_m = c_0 + c_1x_1 + \dots + c_{m-1}x_{m-1}$ is minimized. Such an approximation was called as symmetric approximation of vector statistical data. We solve the problem in more general form. We look for the linear variety in E^m ($(m - r)$ -dimensional plane) in parametric form

$$X = C_0 + t_1C_1 + \dots + t_{m-r}C_{m-r} \in E^m, \quad 1 \leq r \leq m, \quad t_0 = 1,$$

where C_0, C_1, \dots, C_{m-r} are the unknown linear independent vectors in E^m, t_1, \dots, t_{m-r} are the scalar real parameters, E^m is the m -dimensional Euclidean space. This variety can be presented in form of vector-vector linear dependence

$$X_r = A + B X_{m-r},$$

where $X_r^T = (x_{m-r+1}, x_{m-r+2}, \dots, x_m), X_{m-r}^T = (x_1, x_2, \dots, x_{m-r}), B$ is the $(r \times (m - r))$ -matrix. We give the solution in vector-matrix form and the numerical examples compared with the known results from literature and the classical linear regression analysis.

Keywords: approximation, vector statistical data, linear varieties, linear regression analysis, computer data analysis.

Введение. В настоящее время теоретическое обоснование и широкое применение получил линейный регрессионный анализ в виде множественной (скалярно-векторной) линейной регрессии. Задача в этом случае состоит в выборе параметров c_0, c_1, \dots, c_{m-1} линейной функции $x_m = c_0 + c_1x_1 + \dots + c_{m-1}x_{m-1}$, доставляющих минимум сумме квадратов расстояний от наблюдений $x_{m,i}$, эндогенной компоненты ξ_m случайного вектора $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_m)$ до значений $c_0 + c_1x_{1,i} + \dots + c_{m-1}x_{m-1,i}, i = \overline{1, n}$, предсказанных данной функцией:

$$\sum_{i=1}^n (x_{m,i} - c_0 - c_1x_{1,i} - \dots - c_{m-1}x_{m-1,i})^2 \rightarrow \min_{c_0, c_1, \dots, c_{m-1}}. \quad (1)$$

Аппроксимирующая функция $x_m = c_0 + c_1x_1 + \dots + c_{m-1}x_{m-1}$ представляет собой гиперплоскость в E^m , а критерий (1) минимизирует сумму квадратов расстояний от точек $X_i = (x_{1,i}, \dots, x_{m,i}) \in E^m$ до этой гиперплоскости, отсчитываемых вдоль оси x_m , т. е. по вертикали. Полученная при этом функция является условным эмпирическим математическим ожиданием случайной величины ξ_m на случайные величины ξ_1, \dots, ξ_{m-1} .

Возможен также иной подход к аппроксимации векторных данных $X_i = (x_{1,i}, \dots, x_{m,i}) \in E^m$, состоящий в минимизации суммы квадратов расстояний от точек $X_i \in E^m$ до искомой гиперплоскости в E^m , который рассматривался в работах [1, 2], однако не получил широкого освещения в статистической литературе. В данной работе дается независимое решение этой проблемы. В отличие от [1, 2], решение получено в векторно-матричной форме.

1. Линейные многообразия в многомерном арифметическом пространстве. Как известно [3], в R^m можно определить линейные многообразия в параметрической форме

$$X = C_0 + t_1C_1 + \dots + t_{m-r}C_{m-r} \in R^m, 1 \leq r \leq m, t_0 = 1, \quad (2)$$

где $C_0^T = (c_{0,1}, \dots, c_{0,m})$, $C_1^T = (c_{1,1}, \dots, c_{1,m})$, ..., $C_{m-r}^T = (c_{m-r,1}, \dots, c_{m-r,m})$ – линейно независимые векторы в R^m , t_1, \dots, t_{m-r} – скалярные действительные параметры, X – вектор-столбец в R^m . Многообразие (2) называется $(m-r)$ -мерной гиперплоскостью в R^m , а векторы C_1, \dots, C_{m-r} – направляющими векторами этой гиперплоскости.

Для выяснения содержательного смысла линейного многообразия (2) запишем его в виде

$$X = C_0 + CT, \quad (3)$$

где $C = [C_1, C_2, \dots, C_{m-r}]$ – $(m \times (m-r))$ -матрица, столбцами которой являются векторы-столбцы C_1, C_2, \dots, C_{m-r} , а $T^T = [t_1, t_2, \dots, t_{m-r}]$ – вектор параметров t_1, t_2, \dots, t_{m-r} . Представим матрицу C и векторы X, C_0 в виде

$$C = \begin{pmatrix} \bar{C}_{m-r} \\ \bar{C}_r \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} \bar{X}_{m-r} \\ \bar{X}_r \end{pmatrix}, C_0 = \begin{pmatrix} \bar{C}_{0,m-r} \\ \bar{C}_{0,r} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где \bar{C}_{m-r} – $((m-r) \times (m-r))$ -матрица, \bar{C}_r – $(r \times (m-r))$ -матрица, $\bar{X}_{m-r}^T = (x_1, x_2, \dots, x_{m-r})$, $\bar{X}_r^T = (x_{m-r+1}, x_{m-r+2}, \dots, x_m)$, $\bar{C}_{0,m-r}^T = (c_{0,1}, c_{0,2}, \dots, c_{0,m-r})$, $\bar{C}_{0,r}^T = (c_{0,m-r+1}, c_{0,m-r+2}, \dots, c_{0,m})$. Тогда вместо уравнения (3) мы можем записать два уравнения

$$\begin{cases} \bar{X}_{m-r} = \bar{C}_{0,m-r} + \bar{C}_{m-r}T, \\ \bar{X}_r = \bar{C}_{0,r} + \bar{C}_rT. \end{cases} \quad (5)$$

В силу линейной независимости векторов C_1, C_2, \dots, C_{m-r} матрица \bar{C}_{m-r} не вырожденная, и мы можем из первого уравнения системы уравнений (5) найти вектор параметров T :

$$T = (\bar{C}_{m-r})^{-1}(\bar{X}_{m-r} - \bar{C}_{0,m-r}).$$

Подставляя это решение во второе уравнение системы (5), получим

$$\bar{X}_r = \bar{C}_{0,r} + \bar{C}_r(\bar{C}_{m-r})^{-1}(\bar{X}_{m-r} - \bar{C}_{0,m-r}). \quad (6)$$

Последнее выражение показывает, что в случае $(m-r)$ -мерной гиперплоскости в R^m r произвольных компонент вектора X , принадлежащего гиперплоскости, линейно выражаются через остальные $(m-r)$ компонент этого вектора. Формула (6) представляет собой эту зависимость в явной форме для последних r компонент вектора X . В частности, при $m-r=0$ многообразие (2) называется нульмерной гиперплоскостью в E^m с уравнением $X = C_0$ и является точкой в R^m . При $m-r=1$ это одномерная гиперплоскость в R^m , т. е. прямая с уравнением $X = C_0 + t_1C_1$, проходящая через точку C_0 в направлении вектора C_1 . При $m-r=m-1$ это уравнение $(m-1)$ -мерной гиперплоскости в R^m (гиперплоскости в R^m в классическом понимании). Итак, выражение (6) является эквивалентным представлением гиперплоскости (2).

Обратно, легко заметить, что выражение (6) представляет собой векторно-векторную (многомерную) линейную среднюю квадратичную регрессию, если считать, что $\bar{C}_{m-r} = D(\eta_{m-r}) = D_{m-r}$ – дисперсионная матрица некоторого случайного вектора η_{m-r} , $\bar{C}_r = \text{cov}(\eta_r, \eta_{m-r}) = R_{r,m-r}$ – ковариационная матрица случайных векторов η_r и η_{m-r} , $\bar{C}_{0,m-r} = E(\eta_{m-r})$, $\bar{C}_{0,r} = E(\eta_r)$ – математические ожидания случайных векторов η_{m-r} и η_r соответственно. Это значит, что многомерная линейная средняя квадратичная регрессия вида

$$\bar{X}_r = \bar{C}_{0,r} + R_{r,m-r} (D_{m-r})^{-1} (\bar{X}_{m-r} - \bar{C}_{0,m-r})$$

представляет собой $(m-r)$ -мерное многообразие в R^m , имеющее параметрическое уравнение (3) с

$$C = \begin{pmatrix} D_{m-r} \\ R_{r,m-r} \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} \bar{X}_{m-r} \\ \bar{X}_r \end{pmatrix}, C_0 = \begin{pmatrix} \bar{C}_{m-r} \\ \bar{C}_r \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \eta_{m-r} \\ \eta_r \end{pmatrix}.$$

2. Постановка и решение задачи симметричной аппроксимации векторных статистических данных. Пусть $\xi^T = (\xi_1, \dots, \xi_m) \in E^m$ – случайный вектор в E^m со средним значением $A_\xi = E(\xi)$ и положительно определенной дисперсионной матрицей $D_\xi = E((\xi - A_\xi)(\xi - A_\xi)^T)$. Поставим задачу определения векторов C_0, C_1, \dots, C_{m-r} линейного многообразия (2), обеспечивающих минимальную вариацию квадрата расстояния ρ^2 от точки ξ до многообразия:

$$E(\rho^2(\xi, C_0 + t_1 C_1 + \dots + t_{m-r} C_{m-r})) \rightarrow \min_{C_0, C_1, \dots, C_{m-r}}. \quad (7)$$

Перейдем к решению задачи. Квадрат расстояния ρ^2 от точки ξ до линейного многообразия (2) вычисляется по формуле [3]:

$$\rho^2 = \frac{\det(\tilde{C}^T \tilde{C})}{\det(C^T C)}, \quad (8)$$

где $C = [C_1, C_2, \dots, C_{m-r}]$ – $(m \times (m-r))$ -матрица, столбцами которой являются векторы-столбцы C_1, C_2, \dots, C_{m-r} , $\tilde{C} = [C_1, C_2, \dots, C_{m-r}, \xi - C_0] = [C, \xi - C_0]$ – $(m \times (m-r+1))$ -матрица. Рассматривая эти матрицы как блочные, получим

$$Z = C^T C = (z_{i,j}) = (C_i^T C_j), \quad i, j = \overline{1, m-r},$$

$$\tilde{Z} = \tilde{C}^T \tilde{C} = (\tilde{z}_{i,j}) = \begin{pmatrix} C_i^T C_j, & i, j = \overline{1, m-r}, \\ (\xi - C_0)^T C_j, & i = m-r+1, j = \overline{1, m-r}, \\ C_i^T (\xi - C_0), & i = \overline{1, m-r}, j = m-r+1, \\ (\xi - C_0)^T (\xi - C_0), & i, j = m-r+1, \end{pmatrix}.$$

Будем искать единичные ортогональные векторы C_1, C_2, \dots, C_{m-r} . В этом случае искомыми компонентами векторов C_1, C_2, \dots, C_{m-r} будут направляющие косинусы, будут выполняться равенства $C_i^T C_j = 0$ при $i \neq j$, $C_i^T C_i = 1$, матрица Z будет единичной, а матрица \tilde{Z} в развернутой форме примет следующий вид:

$$\tilde{Z} = \begin{pmatrix} 1, & 0, & \dots, & 0, & C_1^T (\xi - C_0) \\ 0, & 1, & \dots, & 0, & C_2^T (\xi - C_0) \\ 0, & 0, & \dots, & 0, & C_3^T (\xi - C_0) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0, & 0, & \dots, & 1, & C_{m-r}^T (\xi - C_0) \\ (\xi - C_0)^T C_1, & (\xi - C_0)^T C_2, & \dots, & (\xi - C_0)^T C_{m-r}, & (\xi - C_0)^T (\xi - C_0) \end{pmatrix}.$$

Определитель матрицы Z равен единице: $\det(C^T C) = 1$. Определитель матрицы \tilde{Z} получим, раскрывая его по элементам последней строки матрицы \tilde{Z} :

$$\rho^2 = \det(\tilde{C}^T \tilde{C}) = (\xi - C_0)^T (\xi - C_0) - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T (\xi - C_0) (\xi - C_0)^T C_i.$$

Нас интересует математическое ожидание случайной величины ρ^2 . Легко понять, что

$$E(\rho^2) = \text{tr} \tilde{D} - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T \tilde{D} C_i, \quad (9)$$

где $\tilde{D} = E((\xi - C_0)(\xi - C_0)^T)$. Преобразуем матрицу \tilde{D} следующим образом:

$$\tilde{D} = E((\xi - C_0)(\xi - C_0)^T) = E(((\xi - E(\xi)) + (E(\xi) - C_0))((\xi - E(\xi)) + (E(\xi) - C_0))^T) = D_\xi + M,$$

где

$$D_\xi = E((\xi - E(\xi))(\xi - E(\xi))^T), \\ M = (E(\xi) - C_0)(E(\xi) - C_0)^T,$$

D_ξ – дисперсионная матрица случайного вектора ξ . С учетом данного представления матрицы \tilde{D} выражение (9) принимает вид

$$E(\rho^2) = \left(\text{tr} D_\xi - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T D_\xi C_i \right) - \left(\text{tr} M - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T M C_i \right). \quad (10)$$

Необходимыми условиями минимума функции $E(\rho^2)$ являются следующие уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial C_0} E(\rho^2) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial C_i} E(\rho^2) = 0, \quad i = \overline{1, m-r},$$

где $\frac{\partial}{\partial C_0} E(\rho^2)$, $\frac{\partial}{\partial C_i} E(\rho^2)$, $i = \overline{1, m-r}$, – производные скалярной функции $E(\rho^2)$ по векторным переменным $C_0, C_1, C_2, \dots, C_{m-r}$ (скалярно-векторные производные) [4, 5]. Дифференцирование $E(\rho^2)$ (10) по C_0 дает уравнение

$$\frac{\partial}{\partial C_0} E(\rho^2) = \frac{\partial}{\partial C_0} \left(\text{tr} M - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T M C_i \right) = -2(E(\xi) - C_0) + \sum_{i=1}^{m-r} C_i C_i^T (E(\xi) - C_0) = 0,$$

из которого получаем

$$C_0 = E(\xi) = A_\xi. \quad (11)$$

При таком значении C_0 получим $M = 0$, $\text{tr} M - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T M C_i = 0$, так что вместо дифференцирования по C_1, C_2, \dots, C_{m-r} функции $E(\rho^2)$ (10) мы можем выполнять дифференцирование функции

$$\phi(C_1, C_2, \dots, C_{m-r}) = \left(\text{tr} D_\xi - \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T D_\xi C_i \right). \quad (12)$$

В результате дифференцирования получим уравнения

$$\frac{d}{dC_k} \phi(C_1, C_2, \dots, C_{m-r}) = -2D_\xi C_k = 0, \quad k = \overline{1, m-r}, \quad 1 \leq r \leq m. \quad (13)$$

Представим матрицу D_ξ в виде $D_\xi = D_1 + \lambda I$, где I – единичная матрица, λ – действительное число. Тогда уравнения (13) примут вид

$$D_1 C_k = \lambda C_k, \quad k = \overline{1, m-r}, \quad 1 \leq r \leq m.$$

Это значит, что искомые векторы C_k являются собственными векторами матрицы $D_1 = D_\xi - \lambda I$. Однако, как известно [6], матрицы D_ξ и $D_\xi - \lambda I$ имеют одни и те же собственные векторы. В таком случае в качестве искомого вектора C_k можно взять собственные векторы дисперсионной матрицы D_ξ случайного вектора ξ . Матрица D_ξ имеет m собственных векторов. При отыскании $(m - r)$ -мерного многообразия нам необходимо из m собственных векторов матрицы D_ξ отобрать $(m - r)$ векторов, доставляющих минимальное значение функции $\phi(C_1, C_2, \dots, C_{m-r})$ (12), или, в силу положительной определенности матрицы D_ξ , максимальное значение функции

$$\psi(C_1, C_2, \dots, C_{m-r}) = \sum_{i=1}^{m-r} C_i^T D_\xi C_i.$$

Можно показать [6], что если C_1, C_2, \dots, C_m – единичные собственные векторы матрицы D_ξ и $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ – соответствующие им собственные числа, то $C_1^T D_\xi C_1 > C_2^T D_\xi C_2 > \dots > C_m^T D_\xi C_m$. В силу этого свойства в качестве направляющих векторов C_1, C_2, \dots, C_{m-r} искомого линейного многообразия следует взять $(m - r)$ собственных векторов матрицы D_ξ , соответствующих максимальным собственным числам. Например, при отыскании прямой линии ($r = m - 1$) нужно выбрать один из m собственных векторов, а именно, собственный вектор C_1 , соответствующий максимальному собственному числу λ_1 . При отыскании $(m - 1)$ -мерной гиперплоскости ($r = 1$) выбираются $m - 1$ собственных векторов C_1, C_2, \dots, C_{m-1} , соответствующих собственным числам $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$. При отыскании точки собственные векторы находить не нужно: искомой точкой C_0 будет математическое ожидание случайного вектора ξ (11).

Таким образом, мы доказали следующую теорему.

Теорема. Пусть $\xi^T = (\xi_1, \dots, \xi_m) \in E^m$ – случайный вектор в m -мерном евклидовом пространстве E^m со средним значением $C_0 = A_\xi = E(\xi)$ и положительно определенной дисперсионной матрицей $D_\xi = E((\xi - A_\xi)(\xi - A_\xi)^T)$, $\lambda_1 > \lambda_2 > \dots > \lambda_m$ – собственные числа матрицы D_ξ , C_1, C_2, \dots, C_m – соответствующие этим числам собственные векторы. Тогда линейное многообразие (2) (или (3)) обеспечивает минимальную вариацию $E(\rho^2(\xi, X))$ квадрата расстояния ρ^2 от точки ξ до этого многообразия. При разбиении в (3) векторов X , C_0 и матрицы C на блоки в виде (4) полученное многообразие (3) может быть представлено в форме (6).

Если теоретические моменты A_ξ , D_ξ случайного вектора ξ заменить соответствующими эмпирическими моментами

$$\hat{A}_\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{o,i}, \tag{14}$$

$$\hat{D}_\xi = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_{o,i} - \hat{A}_\xi)(X_{o,i} - \hat{A}_\xi)^T, \tag{15}$$

где $X_{o,i}$, $i = \overline{1, n}$, – векторы-столбцы наблюдений случайного вектора ξ , то мы получим симметричную эмпирическую аппроксимацию векторных статистических данных линейными многообразиями.

3. Примеры. Для демонстрации техники предложенной аппроксимации и ее графической иллюстрации рассмотрим два примера.

Пример 1. Этот пример взят из работы К. Пирсона [1]. Заданы 4 точки $X_{o,i}^T = (x_{o,1}, x_{o,2}, x_{o,3})$ в трехмерном пространстве:

$$X_{o,1}^T = (2, 16, 219), X_{o,2}^T = (2, 26, 261), X_{o,3}^T = (4, 16, 127), X_{o,4}^T = (4, 26, 231). \tag{16}$$

В [1] получена следующая симметричная аппроксимация этих данных плоскостью:

$$x_3 + 38,02187x_1 - 7,35823x_2 - 169,03778 = 0. \tag{17}$$

В соответствии с подходом нашей работы для получения симметричной аппроксимации необходимо по имеющимся данным найти выборочное среднее \hat{A}_ξ (14) и выборочную дисперсионную матрицу \hat{D}_ξ (15). Получим

$$\hat{A}_\xi = \begin{pmatrix} 3,0000 \\ 21,0000 \\ 209,5000 \end{pmatrix}, \hat{D}_\xi = \begin{pmatrix} 0,0010 & 0 & -0,0305 \\ 0 & 0,0250 & 0,1825 \\ -0,0305 & 0,1825 & 2,5027 \end{pmatrix} \cdot 10^3.$$

Далее необходимо найти собственные числа $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3$ и соответствующие им собственные векторы C_1, C_2, C_3 матрицы \hat{D}_ξ . Имеем

$$\lambda_1 = 2,5165 \cdot 10^3, \lambda_2 = 0,0121 \cdot 10^3, \lambda_3 = 0,0002 \cdot 10^3,$$

$$C_1 = \begin{pmatrix} -0,0121 \\ 0,0730 \\ 0,9973 \end{pmatrix}, C_2 = \begin{pmatrix} 0,1913 \\ 0,9791 \\ -0,0694 \end{pmatrix}, C_3 = \begin{pmatrix} 0,9815 \\ -0,899 \\ 0,0258 \end{pmatrix}.$$

Наконец, записываем аппроксимирующее многообразие в параметрической форме. Для двухмерной плоскости

$$Y = \hat{A}_\xi + t_1 C_1 + t_2 C_2, \quad (18)$$

прямой линии

$$Y = \hat{A}_\xi + t_1 C_1 \quad (19)$$

и точки

$$Y = \hat{A}_\xi. \quad (20)$$

С помощью уравнения (6) вместо уравнения плоскости в параметрической форме (18) мы имеем эквивалентное уравнение в обычной форме:

$$x_3 + 38,02214x_1 - 7,35822x_2 - 169,04363 = 0. \quad (21)$$

Соответствующие коэффициенты уравнений (17) и (21) совпадают с точностью до четырех значащих цифр. Кратчайшее расстояние от точки $X_{0,3}^T = (4,16,127)$ до плоскости (18) (или (21)), подсчитанное по формуле (8), равняется 0,1984, в то время как расстояние от этой точки до плоскости по вертикали составляет 7,6867. Эти числа согласуются с соответствующими числами работы [1]. Сумма квадратов кратчайших расстояний от всех четырех точек до плоскости (18) (или (21)), подсчитанная по формуле (8), составляет 0,7913, а сумма квадратов расстояний от четырех точек до этой же плоскости по вертикали – 1187,7. Полученные цифры служат подтверждением правильности решения оптимизационной задачи (7).

Классическая линейная средняя квадратичная регрессия, рассчитанная по тем же данным (16), определяется выражением

$$x_3 = 209,5 - 30,5(x_1 - 3) + 7,3(x_2 - 21). \quad (22)$$

Сумма квадратов расстояний от четырех точек до этой плоскости по вертикали составляет 961. Это меньше, чем для предыдущей аппроксимации, что также согласуется с теорией.

На рис. 1 изображены заданные точки (16), аппроксимирующие плоскости (17), (21), (22), аппроксимирующая прямая (19) и аппроксимирующая точка (20). Как видно, аппроксимирующая плоскость (21) данной статьи совпадает с плоскостью (17), полученной К. Пирсоном. Вместе с тем эти плоскости отличаются, хотя и незначительно, от плоскости (22), определяемой классической линейной средней квадратичной регрессией.

Пример 2. Моделировались реализации четырехмерного случайного вектора $\xi^T = (\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4)$ с нормальным (гауссовским) распределением, нулевым средним значением $A_\xi^T = (0, 0, 0, 0)$, дисперсиями компонент $D(\xi_1) = D(\xi_2) = D(\xi_3) = D(\xi_4) = 1$ и корреляционной матрицей

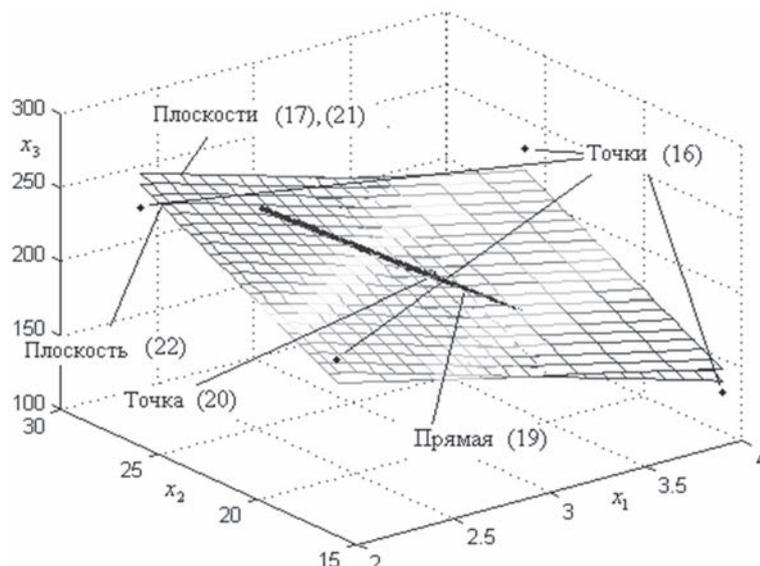


Рис. 1. Графическая иллюстрация к примеру 1

Fig. 1. Graphical illustration to example 1

$$\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0,6 & 0,3 & 0,7 \\ 0,6 & 1 & 0,6 & 0,6 \\ 0,3 & 0,6 & 1 & 0,5 \\ 0,7 & 0,6 & 0,5 & 1 \end{pmatrix}.$$

По одной из выборок объема $n = 100$ получены следующие характеристики: выборочное среднее

$$\widehat{A}_\xi^T = C_0^T = (0,1698 \quad -0,1051 \quad -0,0761 \quad -0,0524),$$

выборочная дисперсионная матрица

$$\widehat{D}_\xi = \begin{pmatrix} 2,5210 & 1,5246 & 0,4992 & 1,5448 \\ 1,5246 & 2,5348 & 1,4030 & 1,4540 \\ 0,4992 & 1,4030 & 3,2561 & 1,1649 \\ 1,5448 & 1,4540 & 1,1649 & 2,5803 \end{pmatrix},$$

собственные числа $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 > \lambda_4$ выборочной дисперсионной матрицы \widehat{D}_ξ

$$\lambda_1 = 6,5369, \lambda_2 = 2,5226, \lambda_3 = 1,0973, \lambda_4 = 0,7354$$

и соответствующие этим собственным числам собственные векторы C_1, C_2, C_3, C_4 :

$$C_1 = \begin{pmatrix} 0,4620 \\ 0,5336 \\ 0,4826 \\ 0,5186 \end{pmatrix}, C_2 = \begin{pmatrix} 0,5481 \\ 0,0575 \\ -0,8088 \\ 0,2052 \end{pmatrix}, C_3 = \begin{pmatrix} -0,1678 \\ 0,6257 \\ 0,0349 \\ 0,7610 \end{pmatrix}, C_4 = \begin{pmatrix} -0,6767 \\ 0,5661 \\ -0,3343 \\ 0,3315 \end{pmatrix}.$$

Полученные собственные векторы позволяют записать уравнения аппроксимирующих плоскостей: нульмерной $X = \widehat{A}_\xi$, одномерной $X = \widehat{A}_\xi + t_1 C_1$, двумерной $X = \widehat{A}_\xi + t_1 C_1 + t_2 C_2$ и трехмерной $X = \widehat{A}_\xi + t_1 C_1 + t_2 C_2 + t_3 C_3$. Остановимся более подробно на двумерной аппроксимирующей плоскости $X = \widehat{A}_\xi + t_1 C_1 + t_2 C_2$, для чего получим ее эквивалентное представление в виде (6). В соответствии с формулами (4) имеем

$$C = (C_1, C_2) = \begin{pmatrix} 0,4620 & 0,5481 \\ 0,5336 & 0,0575 \\ 0,4826 & -0,8088 \\ 0,5186 & 0,2052 \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}, C_0 = \begin{pmatrix} 0,1698 \\ -0,1051 \\ -0,0761 \\ -0,0524 \end{pmatrix},$$

$$\bar{C}_{m-r} = \begin{pmatrix} 0,4620 & 0,5481 \\ 0,5336 & 0,0575 \end{pmatrix}, \bar{C}_r = \begin{pmatrix} 0,4826 & -0,8088 \\ 0,5186 & 0,2052 \end{pmatrix}, \bar{X}_{m-r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \bar{X}_r = \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix},$$

$$\bar{C}_{0,m-r} = \begin{pmatrix} 0,1698 \\ -0,1051 \end{pmatrix}, \bar{C}_{0,r} = \begin{pmatrix} -0,0761 \\ -0,0524 \end{pmatrix}, \bar{C}_r(\bar{C}_{m-r})^{-1} = \begin{pmatrix} -1,7271 & 2,3999 \\ 0,2997 & 0,7123 \end{pmatrix}.$$

По формуле (6) получим

$$\begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0,0761 \\ -0,0524 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -1,7271 & 2,3999 \\ 0,2997 & 0,7123 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 - 0,1698 \\ x_2 + 0,1051 \end{pmatrix}, \quad (23)$$

или

$$\begin{aligned} x_3 &= -0,0761 - 1,7271(x_1 - 0,1698) + 2,3999(x_2 + 0,1051), \\ x_4 &= -0,0524 + 0,2997(x_1 - 0,1698) + 0,7123(x_2 + 0,1051). \end{aligned} \quad (24)$$

Таким образом, двумерная аппроксимирующая плоскость $X = \hat{A}_\xi + t_1 C_1 + t_2 C_2$ эквивалентна линейной связи (23) двумерного вектора (x_3, x_4) с двумерным вектором (x_1, x_2) .

По вектору \hat{A}_ξ^T и матрице \hat{D}_ξ можно также получить классическую линейную среднюю квадратичную регрессию (ξ_3, ξ_4) на (ξ_1, ξ_2) [7]:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -0,0761 \\ -0,0524 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0,4992 & 1,4030 \\ 1,5448 & 1,4540 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2,5210 & 1,5246 \\ 1,5246 & 2,5348 \end{pmatrix}^{-1} \cdot \begin{pmatrix} x_1 - 0,1698 \\ x_2 + 0,1051 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -0,0761 \\ -0,0524 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -0,2149 & 0,6827 \\ 0,4179 & 0,3223 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 - 0,1698 \\ x_2 + 0,1051 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned} x_3 &= -0,0761 - 0,2149(x_1 - 0,1698) + 0,6827(x_2 + 0,1051), \\ x_4 &= -0,0524 + 0,4179(x_1 - 0,1698) + 0,3223(x_2 + 0,1051). \end{aligned} \quad (25)$$

На рис. 2 изображены случайные числа (x_1, x_2, x_4) и аппроксимирующие их плоскости (24), (25), полученные различными методами. Как видно, различные методы аппроксимации приводят в данном примере к существенно различным аппроксимирующим плоскостям.

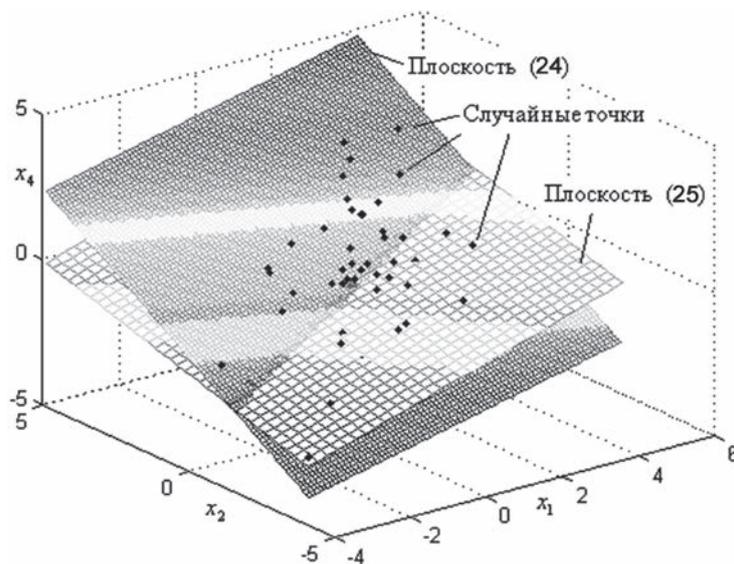


Рис. 2. Графическая иллюстрация к примеру 2
Fig. 2. Graphical illustration to example 2

Заклучение. Предложенная в статье симметричная аппроксимация может быть выполнена как в случае, когда вектор $\xi^T = (\xi_1, \dots, \xi_m)$ является случайным по природе, так и в случае, когда он представляет собой измеренные с ошибками входные и выходные переменные некоторого детерминированного объекта, и мы желаем аппроксимировать этот объект линейной зависимостью. Однако вопрос предпочтительного использования симметричной линейной аппроксимации или линейной регрессии требует отдельных исследований. Можно лишь с уверенностью сказать, что симметричную аппроксимацию следует применять тогда, когда минимизация ее критерия является очевидной целью аппроксимации, например, при отыскании линейных маршрутов, обладающих минимальным (максимальным) суммарным удалением от некоторых объектов.

Список использованных источников

1. Pearson, K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space / K. Pearson / Philos. Mag. – 1901. – Vol. 6, N 2. – P. 559–572.
2. Крамер, Г. Математические методы статистики / Г. Крамер. – М.: Мир, 1975. – 648 с.
3. Утешев, А. Ю. Записная книжка на виртуальном факультете [Электронный ресурс] / А. Ю. Утешев. – Режим доступа: <http://www.apmath.spbu.ru/ru/staff/uteshev/index.html>, свободный.
4. Амосов, А. А. Скалярно-матричное дифференцирование и его приложения к конструктивным задачам теории связи / А. А. Амосов, В. В. Колпаков // Проблемы передачи информации. – 1972. – № 8, вып. 1. – С. 3–15.
5. Муха, В. С. Анализ многомерных данных / В. С. Муха. – Минск: Технопринт, 2004. – 366 с.
6. Вержбицкий, В. М. Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения) / В. М. Вержбицкий. – М.: Высш. шк., 2000. – 266 с.
7. Рао, С. Р. Линейные статистические методы и их применение / С. Р. Рао. – М.: Наука, 1968. – 548 с.

References

1. Pearson K. On lines and planes of closest fit to systems of points in space. *Philosophical Magazine*, 1901, vol. 6, no. 2, pp. 559–572. doi:10.1080/14786440109462720.
2. Cramer H. *Mathematical Methods of Statistics (PMS-9)*. Princeton University Press, 1999. 575 p.
3. Uteshev A.Yu. *Notebook on the virtual faculty*. Available at: <http://www.apmath.spbu.ru/ru/staff/uteshev/index.html>. (in Russian)
4. Amosov A.A., Kolpakov V.V. Scalar-matrix differentiation and its applications to the constructive tasks of communication. *Problemy peredachi informatsii* [Problems of Information Transmission], 1972, no. 8, iss. 1, pp. 3–15. (in Russian)
5. Mukha V.S. *Analysis of multidimensional data*. Minsk, Technoprint, 2004. 366 p. (in Russian)
6. Verzhbitskii V.M. *Numerical methods (linear algebra and nonlinear equations)*. Moscow, Vysshiaia shkola Publ., 2000. 266 p. (in Russian)
7. Rao C.R. *Linear statistical inference and its applications*. 2 ed. Wiley, 1973. 648 p.

Информация об авторе

Муха Владимир Степанович – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры информационных технологий автоматизированных систем, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровка, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: mukha@bsuir.by

Information about the author

Mukha Vladimir Stepanovich – D. Sc. (Engineering), Professor, Professor of the Department of Automated Data Processing Systems, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mukha@bsuir.by

Для цитирования

Муха, В. С. Симметричная аппроксимация векторных статистических данных линейными многообразиями / В. С. Муха // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 23–31.

For citation

Mukha V.S. Symmetric approximation of vector statistical data by linear varieties. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 23–31. (in Russian)

В. Б. Малютин*Институт математики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь***ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНТЕГРАЛОВ
С ПОМОЩЬЮ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ ШТУРМА**

Данная работа касается двух направлений теории функционального интегрирования: представления физических величин, в частности ядра оператора эволюции, в виде функциональных интегралов и методов вычисления функциональных интегралов. Предложен новый метод приближенного вычисления функциональных интегралов по условной мере Винера, который основывается на использовании формулы Фейнмана – Каца, дающей интегральное представление для ядра оператора эволюции, и на представлении ядра с помощью собственных значений и собственных векторов оператора. Предлагаемый подход эффективен при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках большой длины.

Ключевые слова: функциональные интегралы, формула Фейнмана – Каца, ядро оператора эволюции, последовательность Штурма.

V. B. Malyutin*Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus***EVALUATION OF FUNCTIONAL INTEGRALS USING STURM SEQUENCES**

The present work deals with two directions of the theory of functional integration. The first is the representation of physical quantities, in particular the evolution operator kernel in the form of functional integrals. The second is concerned with the methods for calculation of functional integrals. A new method for approximate evaluation of functional integrals with respect the conditional Wiener measure is proposed in this work. This method is based both on the use of the Feynman – Kac formula giving the integral representation of the evolution operator kernel and on the representation of the kernel using eigenvalues and eigenvectors of operator. The proposed method is effective for calculation of functional integrals over a space of functions defined on the intervals of large length.

Keywords: functional integrals, Feynman – Kac formula, evolution operator kernel, Sturm sequences.

Введение. В настоящее время в теории функционального интегрирования существуют различные направления исследования: разработка методов приближенного вычисления функциональных интегралов для различных типов интегралов и мер [1–4], исследование связи между функциональными интегралами и решениями стохастических дифференциальных уравнений [5, 6], применение функциональных интегралов в различных областях физики [7–10] и т. д. Данная работа касается двух направлений теории функционального интегрирования: представления физических величин, в частности ядра оператора эволюции, в виде функциональных интегралов и методов вычисления функциональных интегралов.

Существуют различные методы для вычисления различных типов функциональных интегралов [1–4]. Среди них отметим метод Монте-Карло для приближенного вычисления функциональных интегралов [1, 11, 12], суть которого заключается в том, что вычисляемый интеграл представляется как математическое ожидание некоторой случайной величины, среднее арифметическое независимых реализаций которой дает приближенное значение данному интегралу. Один из методов приближенного вычисления функциональных интегралов – это использование приближенных формул, являющихся точными на классе функциональных многочленов заданной степени (см. [1–4] и библиографию к ним). Такие формулы называются формулами заданной степени точности и широко применяются для приближенного вычисления функциональных интегралов. Они особенно эффективны для функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках малой длины.

В данной работе рассматривается приближенное вычисление функциональных интегралов вида

$$\int \exp \left\{ - \int_s^t V(x(\tau)) d\tau \right\} d\mu_{x_s, x_t}(x), \quad (1)$$

где V – функция, заданная на множестве вещественных чисел R и принимающая значения в R , μ_{x_s, x_t} – условная мера Винера на пространстве функций, заданных на отрезке $[s, t]$ и удовлетворяющих условиям $x(s) = x_s$, $x(t) = x_t$. Интеграл по мере μ_{x_s, x_t} определяется равенством

$$\int \exp \left\{ - \int_s^t V(x(\tau)) d\tau \right\} d\mu_{x_s, x_t}(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_R (n-1) \int_R \exp \left\{ - \sum_{j=1}^n (t_j - t_{j-1}) V(x_j) \right\} \prod_{j=1}^n K_{t_j - t_{j-1}}^0(x_{j-1}, x_j), \quad (2)$$

где $K_{t_j - t_{j-1}}^0(x_{j-1}, x_j) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(t_j - t_{j-1})}} \exp \left(- \frac{(x_j - x_{j-1})^2}{2(t_j - t_{j-1})} \right)$ – ядро оператора $\exp(tH_0)$, $H_0 = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, $s = t_0 < t_1 < \dots < t_n = t$, $x_j = x(t_j)$.

В настоящей работе для вычисления функциональных интегралов (1) предлагается новый метод, который основывается на использовании формулы Фейнмана – Каца [7], дающей интегральное представление для ядра $K_t(x_s, x_t)$ оператора эволюции $\exp(tH) = \exp(t(H_0 - V))$, и представлении ядра $K_t(x_s, x_t)$ с помощью собственных значений и собственных векторов оператора H . Предлагаемый метод эффективен при вычислении функциональных интегралов по пространству функций, заданных на отрезках $[s, t]$ большой длины.

Аналитические результаты. Рассмотрим уравнение

$$\frac{\partial S(t, x)}{\partial t} = HS(t, x), \quad (3)$$

где $H = H_0 - V = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V(x)$.

С помощью формулы Фейнмана – Каца [7] ядро $K_t(x_s, x_t)$ оператора эволюции $\exp(tH)$ представляется в виде функционального интеграла (1). С другой стороны, ядро $K_t(x_s, x_t)$ может быть представлено в виде [13]:

$$K_t(x_s, x_t) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_s) \psi_n(x_t) \exp \{ -\lambda_n(t-s) \}, \quad (4)$$

где $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ – собственные значения и собственные векторы оператора H .

Таким образом, справедливо равенство

$$\int \exp \left\{ - \int_s^t V(x(\tau)) d\tau \right\} d\mu_{x_s, x_t}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(x_s) \psi_n(x_t) \exp \{ -\lambda_n(t-s) \}. \quad (5)$$

Для вычисления $-\lambda_n$, $\psi_n(x)$ в узлах $x_j = -A + jh$, $1 \leq j \leq N-1$, A – некоторое положительное число, заменим функции $\psi_j(x)$, $-A \leq x \leq A$, векторами $\overline{\psi}_j = (\psi_j(-A+h), \psi_j(-A+2h), \dots, \psi_j(A-h))$, $hN = 2A$, оператор $H = \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - V$ аппроксимируем конечно-разностным оператором с матрицей \overline{H} размерности $(N-1) \times (N-1)$, получающейся в результате аппроксимации второй производной в узле x_j выражением $h^{-2}(x_{j+1} - 2x_j + x_{j-1})$.

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & \cdots & 0 & 0 \\ a_1 & b_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & b_{N-2} & c_{N-2} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{N-2} & b_{N-1} \end{pmatrix} = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} -1-h^2V_1 & \frac{1}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ \frac{1}{2} & -1-h^2V_2 & \frac{1}{2} & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & -1-h^2V_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1-h^2V_{N-1} \end{pmatrix},$$

где $V_j = V(-A + jh)$, $1 \leq j \leq N-1$.

Для вычисления собственных значений $-\bar{\lambda}_j$ трехдиагональной матрицы \bar{H} можно воспользоваться методом последовательностей Штурма [14]. Рассмотрим следующую последовательность полиномов, известную как последовательность Штурма:

$$D_0(\lambda) = 1, \quad D_1(\lambda) = b_1 - \lambda, \quad D_j(\lambda) = (b_j - \lambda)D_{j-1}(\lambda) - a_{j-1}c_{j-1}D_{j-2}(\lambda), \quad 2 \leq j \leq N-1.$$

Для произвольного λ определим функцию $s(\lambda)$ как число совпадений знаков у следующих друг за другом членов последовательности

$$D_0(\lambda), D_1(\lambda), D_2(\lambda), \dots, D_{N-1}(\lambda),$$

причем если $D_j(\lambda) = 0$, то в качестве знака этого члена будем брать знак $D_{j-1}(\lambda)$. Тогда значение функции $s(\lambda)$ равно числу собственных значений матрицы \bar{H} больших или равных λ .

Для вычисления собственных векторов $\bar{\psi}_j$ трехдиагональной матрицы \bar{H} можно использовать метод обратной итерации [14].

С помощью вычисленных приведенным способом приближений $-\bar{\lambda}_n$, $\bar{\psi}_n(x)$, и формулы (5) получаем приближенные значения функционального интеграла (1).

Численные результаты. В качестве примера рассмотрим вычисление функционального интеграла (1) в случае $V(x) = \frac{1}{2}(-1 + x^2)$. Для данного потенциала $V(x)$ с помощью метода последовательностей Штурма получаем приближенные значения для собственных значений $\bar{\lambda}_0, \bar{\lambda}_1$ трехдиагональной матрицы \bar{H} . Значения $\bar{\lambda}_0, \bar{\lambda}_1$ аппроксимируют собственные значения λ_0, λ_1 оператора H . При $A = 4$, $N = 20$, $-\bar{\lambda}_0 = 0,0022$, $-\bar{\lambda}_1 = -0,9736$. Для сравнения точные значения $-\lambda_0 = 0$, $-\lambda_1 = -1$.

С помощью метода обратной итерации находим приближения собственных векторов $\bar{\psi}_0, \bar{\psi}_1$ трехдиагональной матрицы \bar{H} . Векторы $\bar{\psi}_0, \bar{\psi}_1$ аппроксимируют собственные векторы ψ_0, ψ_1 оператора H .

На рис. 1, 2 приведены численные значения для функций $\bar{\psi}_0(x), \bar{\psi}_1(x)$ соответственно при $A = 4$, $N = 20$.

С помощью полученных приближений для λ_0, λ_1 и ψ_0, ψ_1 из формулы (5) получаем приближенное значение для функционального интеграла (1). На рис. 3 приведены численные значения для функционального интеграла (1) при $s = 0$, $x_s = y = 0$, $t = 1$, $A = 4$, $N = 20$ и различных значениях $x = x_t$.

Точные значение интеграла при $s = 0$ получаются из равенства [7, 13]:

$$K_t(x_0, x_t) = \frac{e^{\frac{t}{2}}}{\sqrt{2\pi \sinh(t)}} \exp \left\{ -\frac{e^t (e^{-t}x - x_0)^2}{2 \sinh(t)} - x^2 + x_0^2 \right\}.$$

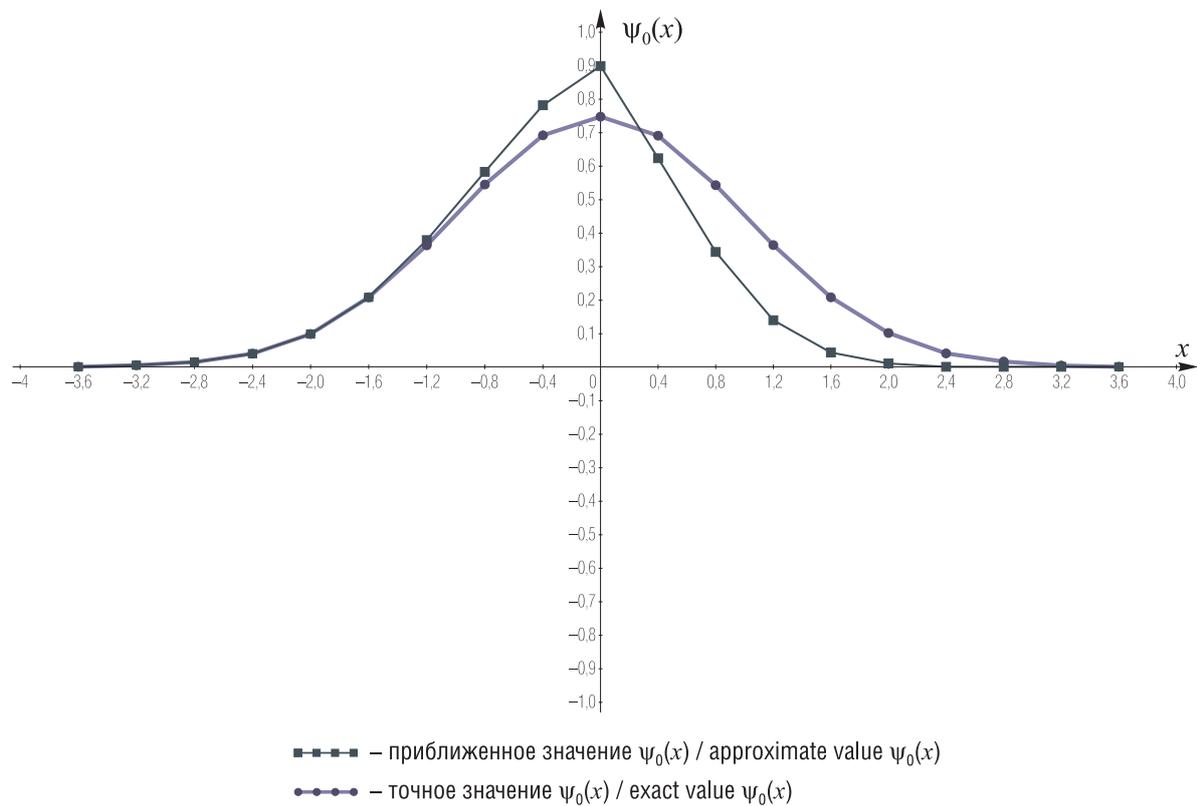


Рис. 1. Значения функции $\psi_0(x)$

Fig. 1. Values of the function $\psi_0(x)$

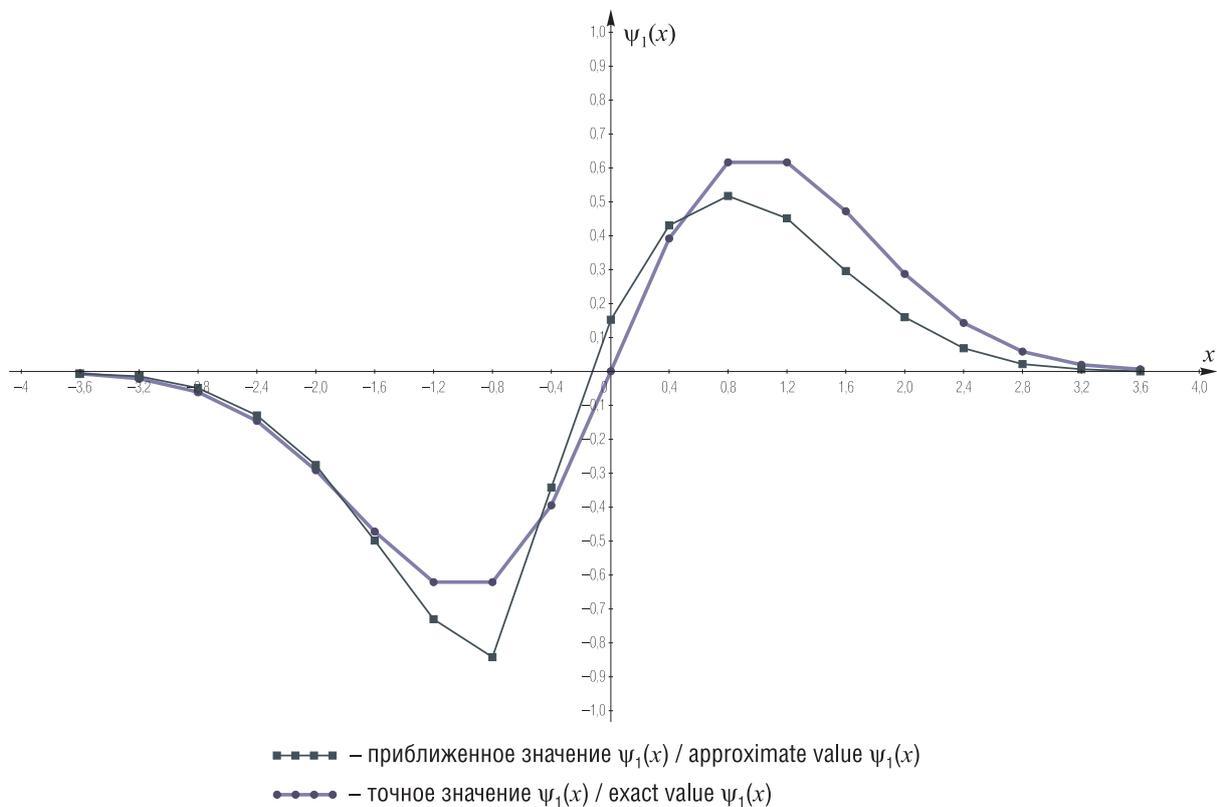


Рис. 2. Значения функции $\psi_1(x)$

Fig. 2. Values of the function $\psi_1(x)$

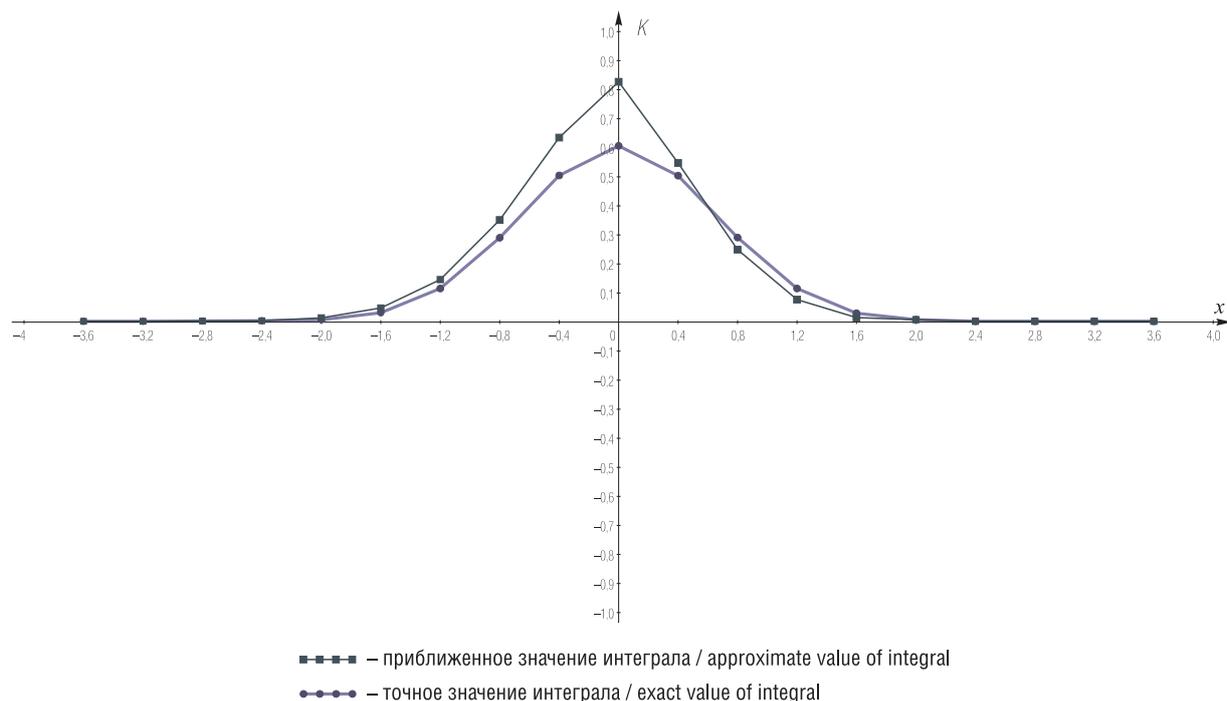


Рис. 3. Значения для функционального интеграла

Fig. 3. Values of the functional integral

Список использованных источников

1. Янович, Л. А. Приближенное вычисление континуальных интегралов по гауссовым мерам / Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника. 1976. – 383 с.
2. Егоров, А. Д. Приближенные методы вычисления континуальных интегралов / А. Д. Егоров, П. И. Соболевский, Л. А. Янович. – Минск: Наука и техника. 1985. – 310 с.
3. Egorov, A. D. Functional integrals: Approximate evaluation and Applications / A. D. Egorov, P. I. Sobolevsky, L. A. Yanovich. – Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1993.
4. Егоров, А. Д. Введение в теорию и приложения функционального интегрирования / А. Д. Егоров, Е. П. Жидков, Ю. Ю. Лобанов. – М.: Физматлит, 2006. – 400 с.
5. Langouche, F. Functional integration and semi-classical expansions / F. Langouche, D. Roekaerts, E. Tirapegui. – Dordrecht: Reidel Pub.Co., 1982. – 324 с.
6. Horacio, S. Wio. Application of path integration to stochastic process: an introduction / S. Wio. Horacio. – World Scientific Publishing Company, 2013. – 176 p.
7. Glimm, J. Quantum Physics. A functional integral point of view / J. Glimm, A. Jaffe. – Berlin; Heidelberg; New York: Springer-Verlag, 1981. – 417 p.
8. Feynman, R. P. Quantum mechanics and path integrals / R. P. Feynman, A. R. Hibbs. – McGraw-Hill, New York, 1965. – 377 p.
9. Kleinert, H. Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics, and financial markets / H. Kleinert. – Singapore: World Scientific Publishing, 2004. – 1592 p.
10. Боголюбов, Н. Н. Введение в теорию квантованных полей / Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков. – М., 1976. – 479 с.
11. Решение краевых задач методом Монте-Карло / Б. С. Елепов [и др.]. – Новосибирск: Наука, 1980. – 174 с.
12. Сабельфельд, К. К. О приближенном вычислении винеровских континуальных интегралов методом Монте-Карло / К. К. Сабельфельд // Журн. вычисл. математики и мат. физики. – 1979. – Т. 19, № 1. – С. 29–43.
13. Risken, H. The Fokker-Plank equation: methods of solution and applications / H. Risken. – Springer-Verlag, 1984. – 472 p.
14. Wilkinson, J. H. The algebraic eigenvalue problem / J. H. Wilkinson. – Oxford, 1965. – 662 p.

References

1. Yanovich L.A. *Approximate calculation of continual integrals through the Gaussian measures*. Minsk, Nauka i tekhnika, 1976. 383 p. (in Russian)
2. Egorov A.D., Sobolevsky P.I., Yanovich L.A. *Approximate methods for calculation of continual integrals*. Minsk, Nauka i tekhnika, 1985. 310 p. (in Russian)
3. Egorov A.D., Sobolevsky P.I., Yanovich L.A. *Functional integrals: Approximate evaluation and Applications*. Dordrecht, Kluwer Academic Publishers, 1993.

4. Egorov A.D., Zhidkov E.P., Lobanov Yu.Yu. *An introduction to the theory and application of functional integration*. Moscow: Fizmatlit, 2006. 400 p. (in Russian)
5. Langouche F., Roekaerts D., Tirapegui E. *Functional integration and semi-classical expansions*. Dordrecht, D. Reidel Pub.Co., 1982. 324 p.
6. Wio H.S. *Application of Path Integration to Stochastic Processes: An Introduction*. World Scientific Publishing Company, 2013. 176 p.
7. Glimm J., Jaffe A. *Quantum Physics. A functional integral point of view*. Berlin-Heidelberg-New York, Springer-Verlag, 1981. 417 p.
8. Feynman R.P., Hibbs A.R. *Quantum mechanics and path integrals*. New York, McGraw-Hill, 1965. 377 p.
9. Kleinert H. *Path integrals in quantum mechanics, statistics polymer physics, and financial markets*. Singapore: World Scientific Publishing, 2004. 1592 p.
10. Bogolyubov N.N., Shirkov D.V. *An introduction to the theory of quantum fields*. Moscow, Nauka, 1976. 479 p. (in Russian)
11. Elepov B.S., Kronberg A.A., Mikhailov G.A., Sabel'fel'd K.K. *Solution of boundary-value problems by the Monte-Carlo method*. Novosibirsk: Nauka, 1980. 174 p.
12. Sabel'fel'd K.K. *Approximate evaluation of wiener continual integrals by the Monte Carlo method*. *USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1979, vol. 19, no. 1, pp. 29–43. doi:10.1016/0041-5553(79)90064-8.
13. Risken H., Frank T. *The Fokker-Plank equation: methods of solution and applications*. Springer-Verlag, 1984. 472 p. doi:10.1007/978-3-642-61544-3.
14. Wilkinson J.H. *The algebraic eigenvalue problem*. Oxford, 1965. 662 p.

Информация об авторе

Малютин Виктор Борисович – ведущий научный сотрудник, Институт математики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 11, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: malyutin@im.bas-net.by

Information about the author

Malyutin Victor Borisovich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Leading Researcher, Institute of Mathematics of the National Academy of Sciences of Belarus (11, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: malyutin@im.bas-net.by

Для цитирования

Малютин, В. Б. Вычисление функциональных интегралов с помощью последовательностей Штурма / В. Б. Малютин // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 32–37.

For citation

Malyutin V.B. Evaluation of functional integrals using the Sturm sequences. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 32–37. (in Russian)

Во Тхи Ким Туен

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
Хюэский промышленный колледж, Хюэ, Вьетнам*

МОНОТОННЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ДЛЯ МОДЕЛИ ШНЭКЕНБЕРГ

В настоящей работе построена каноническая форма векторно-разностных схем. Дано определение монотонности таких разностных схем, связанное со свойством положительности разностного решения. На основе этого определения построены монотонные разностные схемы для модели Шнэкенберг с граничными условиями Дирихле и Неймана. Эта модель представляет собой полунелинейную реакционно-диффузную систему и играет важную роль при математическом моделировании в областях физической химии и биологии. При построении монотонной разностной схемы для указанной модели с граничным условием Неймана основная идея состоит в том, чтобы использовать полуполные узлы в граничных точках задания краевых условий второго рода. Представлены результаты вычислительных экспериментов, подтверждающих эффективность предложенных методов. Численное решение получено без нефизических осцилляций.

Ключевые слова: модель Шнэкенберг, монотонная разностная схема.

Vo Thi Kim Tuyen

*Belarusian State University, Minsk, Belarus
Hue Industrial College, Hue, Vietnam*

MONOTONE DIFFERENCE SCHEMES FOR THE SCHNACKENBERG MODEL

In this article the canonical form of the vector-difference schemes is constructed. The definition of the monotonicity of difference schemes is given. This definition is related to the positivity property of the difference solution. Based on this definition, the monotone difference schemes for the Schnackenberg model with the Dirichlet and Neumann boundary conditions are constructed. This model is a semi-nonlinear reaction-diffusion system, and it plays an important role in mathematical modeling in the fields of physical chemistry and biology. In constructing a monotone difference scheme for this model with the Neumann boundary condition, the idea of half-integral nodes at the boundary points under the second-kind boundary conditions is used. The results of numerical experiments have confirmed the effectiveness of the suggested methods. The numerical solution without nonphysical oscillation is obtained.

Keywords: Schnackenberg model, monotone difference scheme.

Введение. Монотонные разностные схемы играют важную роль при математическом моделировании прикладных задач, так как позволяют получить численное решение без нефизических осцилляций [1]. Исследованию монотонных разностных схем посвящена обширная литература (см., напр. [2, 3]). Следует также отметить работы по изучению свойств монотонных разностных схем для нелинейных краевых задач математической физики [4]. Значительно менее исследованы эти вопросы для систем параболических уравнений [5, 6]. В статье [7] строится монотонная разностная схема для системы пороупругости. Исследование схем для слабо связанных линейных эллиптических и квазилинейных параболических систем уравнений проведено в [8].

Целью настоящей работы является построение монотонных разностных схем для модели Шнэкенберг, которая представляет собой полунелинейную реакционно-диффузную систему. Эта модель, введенная в 1979 г., играет важную роль при математическом моделировании прикладных задач физической химии и биологии [9–11]. В математическом плане эти системы относятся к так называемым слабо связанным параболическим системам уравнений [12].

1. Модель Шнэкенберг. Модель описывает тримолекулярную химическую реакцию между двумя химическими продуктами X , Y и двумя химическими источниками A , B [11]:

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - ku + u^2 v + a, & x \in \Omega, t > 0, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_2 \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - u^2 v + b, & x \in \Omega, t > 0, \end{cases} \quad x \in \Omega, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

с начальными условиями

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad v(x, 0) = v_0(x), \quad x \in \bar{\Omega}, \quad (2)$$

где $\bar{\Omega} = \{x : 0 \leq x \leq l\}$, $\bar{\Omega} = \Omega \cup \partial\Omega$, $\partial\Omega = \{x = 0, x = l\}$, $u(x, t)$ и $v(x, t)$ – концентрации химических продуктов X и Y в момент t и положении $x \in \Omega$, положительные константы d_1, d_2 – коэффициенты диффузии химических продуктов X, Y , положительные константы a, b – концентрации химических источников A и B , константа k – положительная. Начальные концентрации $u_0(x), v_0(x), x \in \bar{\Omega}$ – неотрицательные функции.

Будем рассматривать граничные условия Дирихле (химическая реакция под воздействием внешних условий):

$$u(t, x) = \mu_1(t), \quad v(t, x) = \mu_2(t), \quad x \in \partial\Omega, t > 0, \quad (3)$$

или граничные условия Неймана (химическая реакция в закрытой среде):

$$\frac{\partial u}{\partial n} = \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad x \in \partial\Omega, t > 0. \quad (4)$$

Тримолекулярные реакции представляют собой реакции, которые требуют участия трех индивидуальных частиц в элементарном процессе.

2. Вспомогательные результаты. Приведем несколько результатов из [8], которые используются для доказательства монотонности разностных схем для модели Шнэкенберг.

Пусть в некоторой ограниченной области $\bar{\Omega} \in R^n$ задана сетка $\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \partial\omega_h$, где ω_h – множество внутренних узлов и $\partial\omega_h$ – множество граничных узлов.

Рассмотрим векторное уравнение вида

$$A(P)\bar{Y}(P) = \sum_{Q \in \mathcal{M}'(P)} B(P, Q)\bar{Y}(Q) + \bar{F}(P), \quad P \in \omega_h, \quad (5)$$

аналогично скалярному случаю называемое канонической формой записи векторно-разностной схемы [2]. Здесь матрицы $A(P) = \{a_{ij}(P)\}_{m \times m}$, $B(P, Q) = \{b_{ij}(P, Q)\}_{m \times m}$ и векторно-правая часть $\bar{F}(P) = (f_1(P), f_2(P), \dots, f_m(P))^T$ заданы, векторная функция $\bar{Y}(P) = (y_1(P), y_2(P), \dots, y_m(P))^T$ неизвестна. Множество $\mathcal{M}(P) \subset \omega_h$ – шаблон уравнения (5) в узле $P \in \omega_h$, содержащее данную точку, $\mathcal{M}'(P) = \mathcal{M}(P) \setminus P$ – окрестность точки P .

Предполагаем заданными граничные условия Дирихле для всех переменных, т. е.

$$\bar{Y}(P) = \bar{\mu}(P), \quad P \in \partial\omega_h, \quad (6)$$

где $\bar{\mu}(P) = (\mu_1(P), \mu_2(P), \dots, \mu_m(P))^T$.

Определим следующие величины:

$$\max_{P \in \bar{\omega}_h} \bar{Y}(P) = \max_{1 \leq k \leq m} \left(\max_{P \in \bar{\omega}_h} y_k(P) \right), \quad \min_{P \in \bar{\omega}_h} \bar{Y}(P) = \min_{1 \leq k \leq m} \left(\min_{P \in \bar{\omega}_h} y_k(P) \right), \quad (7)$$

$$\|\bar{Y}\|_{\bar{C}} = \max_{1 \leq k \leq m} \left(\max_{P \in \bar{\omega}_h} |y_k(P)| \right), \quad \|\bar{Y}\|_{C\partial\omega_h} = \max_{1 \leq k \leq m} \left(\max_{P \in \partial\omega_h} |y_k(P)| \right). \quad (8)$$

Будем использовать следующее определение из [8]: матрица $A = \{a_{ij}\}_{m \times n}$ положительна – $A = \{a_{ij}\}_{m \times n} \geq 0$, если все ее элементы положительны – $a_{ij} \geq 0, \forall i = 1, \dots, m; j = 1, \dots, n$.

Определение [8]. Векторно-разностная схема (5)–(6) называется монотонной, если для ее решения выполнены следующие предложения:

если $\vec{F}(P) \geq 0$, $P \in \omega_h$, $\vec{\mu}(P) \geq 0$, $P \in \partial\omega_h$, то $\vec{Y}(P) \geq 0$, $P \in \bar{\omega}_h$,

если $\vec{F}(P) \leq 0$, $P \in \omega_h$, $\vec{\mu}(P) \leq 0$, $P \in \partial\omega_h$, то $\vec{Y}(P) \leq 0$, $P \in \bar{\omega}_h$.

Введем матрицы $D^{(1)}(P) = \left\{ d_{ij}^{(1)}(P) \right\}_{m \times m}$ и $D(P) = \text{diag} \{ d_{11}(P), d_{22}(P), \dots, d_{mm}(P) \}$, определяемые следующим образом:

$$D^{(1)}(P) = A(P) - \sum_{Q \in \mathcal{M}'(P)} B(P, Q), \quad d_{ii}(P) = \sum_{j=1}^m d_{ij}^{(1)}(P), \quad i = \overline{1, m}.$$

Матрицу $A(P)$ можно переписать в виде $A(P) = A^{(1)}(P) - A^{(2)}(P)$, где

$$A^{(1)}(P) = \text{diag} \{ a_{11}^{(1)}(P), a_{22}^{(1)}(P), \dots, a_{mm}^{(1)}(P) \}, \quad a_{ii}^{(1)}(P) = a_{ii}(P), \quad i = \overline{1, m},$$

$$A^{(2)}(P) = \left\{ a_{ij}^{(2)}(P) \right\}_{m \times m}, \quad a_{ii}^{(2)}(P) = 0, \quad a_{ij}^{(2)}(P) = -a_{ij}(P), \quad i \neq j, \quad i, j = \overline{1, m}.$$

Тогда векторное уравнение (5)–(6) запишем в виде

$$A^{(1)}(P)\vec{Y}(P) = \sum_{Q \in \mathcal{M}'(P)} B(P, Q)\vec{Y}(Q) + A^{(2)}(P)\vec{Y}(P) + \vec{F}(P), \quad P \in \omega_h, \quad (9)$$

$$\vec{Y}(P) = \vec{\mu}(P), \quad P \in \partial\omega_h. \quad (10)$$

Теорема 1 [8]. Если для матричных коэффициентов системы (9)–(10) выполнены условия

$$A^{(1)}(P) > 0, \quad A^{(2)}(P) \geq 0, \quad B(P, Q) > 0, \quad D(P) > 0 \quad \forall Q \in \mathcal{M}'(P), \quad (11)$$

тогда векторно-разностная схема (5)–(6) монотонна и для нее имеет место двусторонняя оценка вида

$$m_1 \leq y_j(P) \leq m_2, \quad P \in \bar{\omega}_h, \quad j = 1, \dots, m, \quad (12)$$

где

$$m_1 = \min \left\{ \min_{P \in \partial\omega_h} \vec{\mu}(P), \min_{P \in \omega_h} \left(D^{-1}(P) \vec{F}(P) \right) \right\}, \quad m_2 = \max \left\{ \max_{P \in \partial\omega_h} \vec{\mu}(P), \max_{P \in \omega_h} \left(D^{-1}(P) \vec{F}(P) \right) \right\}.$$

Доказательство монотонности векторно-разностной схемы проводится на основе анализа двусторонней оценки (12).

3. Векторно-разностная схема для задачи с граничными условиями Дирихле. Построим монотонную векторно-разностную схему для задачи (1)–(3). Введем следующие равномерные пространственно-временные сетки $\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$:

$$\bar{\omega}_\tau = \{ t_n = n\tau, \quad n = 0, 1, \dots, N_0, \quad \tau N_0 = T \}, \quad \bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{ t_0 = 0 \},$$

$$\bar{\omega}_h = \omega_h \cup \partial\omega_h, \quad \omega_h = \left\{ x_i = ih, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad h = \frac{L}{N} \right\}, \quad \partial\omega_h = \{ x_0 = 0, x_N = L \}.$$

Для нахождения приближенных значений исходных функций будем использовать следующие сеточные функции:

$$y_{1,i}^{n+1} = y_1(x_i, t + \tau), \quad y_{2,i}^{n+1} = y_2(x_i, t + \tau), \quad i = \overline{0, N}.$$

На сетке $\bar{\omega}_{h\tau}$ аппроксимируем систему (1)–(3) разностной схемой вида

$$\begin{cases} \hat{y}_{1,t,i} = d_1 \hat{y}_{1,\bar{x}x,i} - k \hat{y}_{1,i} + y_{1,i}^2 \hat{y}_{2,i} + a, & i = 0, \dots, N-1, \\ \hat{y}_{2,t,i} = d_2 \hat{y}_{2,\bar{x}x,i} - y_{1,i}^2 \hat{y}_{2,i} + b, \end{cases} \quad (13)$$

$$y_{1,i}^0 = u_0(x_i), \quad y_{2,i}^0 = v_0(x_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (14)$$

$$\hat{y}_1(x) = \hat{\mu}_1, \quad \hat{y}_2(x) = \hat{\mu}_2, \quad x \in \partial\omega_h. \quad (15)$$

Запишем ее в каноническом виде (9):

$$A_i^{(1)} \bar{Y}_i^{n+1} = B_{1i} \bar{Y}_{i-1}^{n+1} + B_{2i} \bar{Y}_{i+1}^{n+1} + A_i^{(2)} \bar{Y}_i^{n+1} + \bar{F}_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad (16)$$

$$\bar{Y}_i^0 = \bar{U}_0, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (17)$$

$$\bar{Y}^{n+1}(x) = \bar{\mu}^{n+1}, \quad x \in \partial\omega_h. \quad (18)$$

Здесь

$$Y_i^{n+1} = (y_{1,i}^{n+1}, y_{2,i}^{n+1})^T, \quad i = \overline{0, N} - \text{неизвестная векторная функция};$$

$$\bar{F}_i^n = \bar{Y}_i^n + \tau \bar{F}_1 = (y_{1,i}^n + \tau a, y_{2,i}^n + \tau b)^T, \quad i = \overline{1, N-1} - \text{вектор правой части};$$

$$\bar{\mu}^{n+1} = (\mu_1^{n+1}, \mu_2^{n+1})^T;$$

$$A_i^{(1)}, A_i^{(2)}, B_{1i}, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad B_{2i}, \quad i = \overline{1, N-1} - \text{квадратные матрицы коэффициентов размеров } 2 \times 2:$$

$$A_i^{(1)} = \text{diag} \left\{ 1 + \frac{2\tau}{h^2} d_1 + \tau k, 1 + \frac{2\tau}{h^2} d_2 + \tau (y_{1,i}^n)^2 \right\}, \quad A_i^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & \tau (y_{1,i}^n)^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$B_{1,i} = \text{diag} \left\{ \frac{\tau}{h^2} d_1, \frac{\tau}{h^2} d_2 \right\}, \quad B_{2,i} = \text{diag} \left\{ \frac{\tau}{h^2} d_1, \frac{\tau}{h^2} d_2 \right\}, \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Так как все входящие в (16) матрицы положительны, то имеет место

Теорема 2. Векторно-разностная схема (16)–(18) является монотонной.

Доказательство. По индукции предполагаем, что $y_{1,i}^n \geq 0, y_{2,i}^n \geq 0$. Покажем теперь, что сеточные функции $y_{1,i}^{n+1}, y_{2,i}^{n+1}$ также неотрицательны для всех i . Для удобства сначала докажем, что $y_{2,i}^{n+1} \geq 0, i = 0, 1, \dots, N$. Если минимум функции $y_{2,i}^{n+1}$ достигается на границе $\partial\omega_h$, тогда

$$y_{2,i}^{n+1} \geq \min_{0 \leq i \leq N} y_{2,i}^{n+1} = \mu_2^{n+1} \geq 0. \quad (19)$$

Если минимум функции $y_{2,i}^{n+1}$ достигается в какой-то внутренней точке $x_{i,0} : 1 \leq i^0 \leq N-1$, то из уравнения (13) находим

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{2\tau}{h^2} d_2 + \tau (y_{1,i^0}^n)^2 \right) y_{2,i^0}^{n+1} &= \frac{\tau}{h^2} d_2 y_{2,i^0-1}^{n+1} + \frac{\tau}{h^2} d_2 y_{2,i^0+1}^{n+1} + y_{2,i^0}^n + \tau b, \\ y_{2,i^0}^{n+1} &\geq \frac{1}{1 + \tau (y_{1,i^0}^n)^2} (y_{2,i^0}^n + \tau b) \geq 0. \end{aligned} \quad (20)$$

Из (19) и (20) получим $y_{2,i}^{n+1} \geq 0, i = 0, 1, \dots, N$.

Теперь докажем, что $y_{1,i}^{n+1} \geq 0, i = 0, 1, \dots, N$.

Если минимум функции $y_{1,i}^{n+1}$ достигается на границе $\partial\omega$, тогда

$$y_{1,i}^{n+1} \geq \min_{0 \leq i \leq N} y_{1,i}^{n+1} = \mu_1^{n+1} \geq 0. \quad (21)$$

Если $\min_{0 \leq i \leq N} y_{1,i}^{n+1} = y_{1,i^*}^{n+1}, 1 \leq i^* \leq N-1$, тогда из уравнения (13) получаем

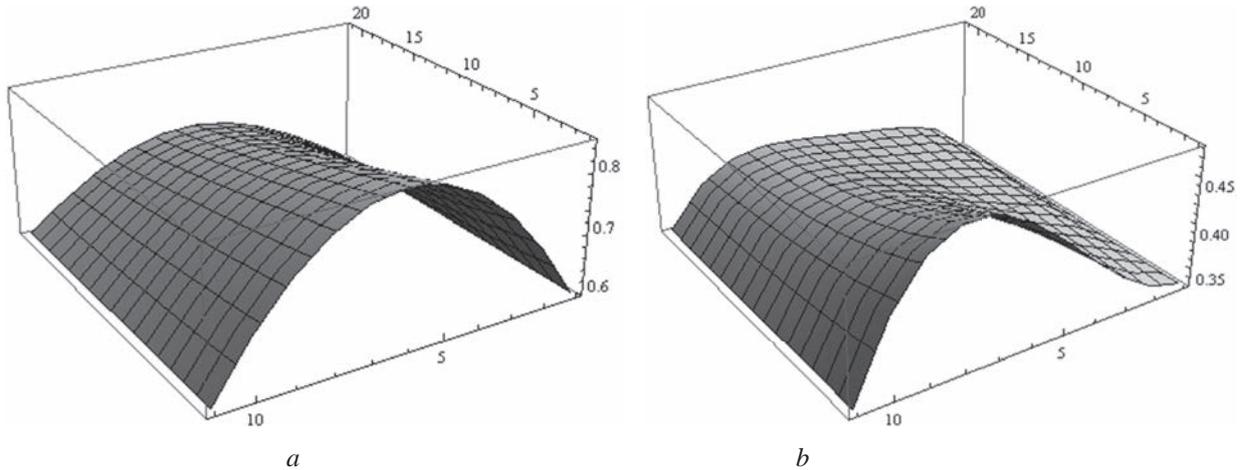


Рис. 1. Численные решения: *a* – для функции $u(x,t)$; *b* – для функции $v(x,t)$
 Fig. 1. Numerical solutions: *a* – of the function $u(x,t)$; *b* – of the function $v(x,t)$

$$\left(1 + \frac{2\tau}{h^2}d_1 + \tau k\right)y_{1,i}^{n+1} = \frac{\tau}{h^2}d_1 y_{1,i^*-1}^{n+1} + \frac{\tau}{h^2}d_1 y_{1,i^*+1}^{n+1} + \tau \left(y_{1,i^*}^n\right)^2 y_{2,i^*}^{n+1} + y_{1,i^*}^n + \tau a,$$

$$(1 + \tau k)y_{1,i}^{n+1} \geq \tau \left(y_{1,i^*}^n\right)^2 y_{2,i^*}^{n+1} + y_{1,i^*}^n + \tau a \geq y_{1,i^*}^n + \tau a,$$

$$y_{1,i}^{n+1} \geq \min_{0 \leq i \leq N} y_{1,i}^{n+1} \geq \frac{1}{1 + \tau k} \left(y_{1,i}^n + \tau a\right) \geq 0. \quad (22)$$

Из (21) и (22) для всех $i = 0, \dots, N$ получим

$$y_{1,i}^{n+1} \geq 0.$$

Следовательно, теорема доказана.

Вычислительный эксперимент 1. Рассмотрим вычислительный эксперимент для модели Шнэкенберг. Соответствующая модель взята из [13] со следующими входными данными: $a = 0,6$; $b = 0,2$; $d_1 = d_2 = 1/40$; $k = 1,2$; $0 \leq x \leq 1$; $0 \leq t \leq 1$; $u(0,t) = u(1,t) = 0,6$; $v(0,t) = v(1,t) = b/a$; $u_0(x) = 0,2 + x(1-x)$; $v_0(x) = b/a + x^2(1-x)$.

Нетрудно убедиться, что все входные данные положительны для всех $x \in [0,1]$, поэтому по теореме 2 построенная схема (16)–(18) монотонна и соответствующие компоненты вектора решения $\vec{Y} = (y_1, y_2)^T$ неотрицательны.

Введем шаги $h = 1/10$ и $\tau = 1/20$. Решая эту схему методом матричной прогонки, получим численное решение нефизических осцилляций, изображенное на рис. 1.

4. Векторно-разностная схема для задачи с граничными условиями Неймана. В этом разделе рассмотрим модель Шнэкенберг (1)–(2) с граничными условиями Неймана (4). Построим для этой модели монотонную разностную схему. Основная идея состоит в том, чтобы использовать полущелые узлы при аппроксимации граничных условий второго рода [1].

Можно переписать задачу (1)–(2) с граничными условиями (4) с использованием потоков

$$W_1(x,t) = \frac{\partial u(x,t)}{\partial x}, \quad W_2(x,t) = \frac{\partial v(x,t)}{\partial x}:$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t} = d_1 \frac{\partial W_1}{\partial x} - ku + u^2v + a, \\ \frac{\partial v}{\partial t} = d_2 \frac{\partial W_2}{\partial x} - u^2v + b, \end{cases} \quad (23)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad v(x,0) = v_0(x), \quad (24)$$

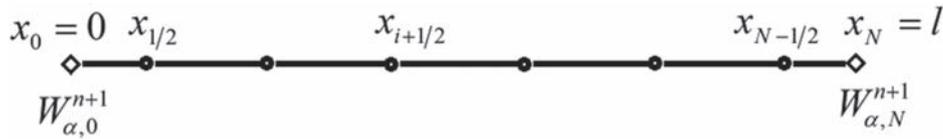


Рис. 2. Пространственные сетки
Fig. 2. Space grids

$$W_1(t, 0) = W_2(t, 0) = 0, \quad (25)$$

$$W_1(l, t) = W_2(l, t) = 0. \quad (26)$$

Введем следующие равномерные пространственно-временные сетки $\omega_{h\tau} = \omega_h \times \bar{\omega}_\tau$ (рис. 2):

$$\bar{\omega}_\tau = \{t_n = n\tau, n = 0, 1, \dots, N_0, \tau N_0 = T\}, \quad \bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{t_0 = 0\},$$

$$\omega_h = \left\{ x_{i+1/2} = (i+1/2)h, i = \overline{0, N-1}, h = \frac{l}{N} \right\}.$$

Для нахождения приближенных значений исходных функций будем использовать следующие сеточные функции:

$$y_{1,i+1/2}^{n+1} = y_1(x_{i+1/2}, t + \tau), \quad y_{2,i+1/2}^{n+1} = y_2(x_{i+1/2}, t + \tau), \quad i = 0, \dots, N-1;$$

т. е. приближенные значения сеточного решения будем вычислять в полужелтых узлах.

На сетке $\omega_{h\tau}$ исходную дифференциальную задачу (23)–(26) аппроксимируем следующей разностной схемой:

$$\begin{cases} \hat{y}_{1,t i+1/2} = d_1 \frac{\hat{W}_{1h,i+1} - \hat{W}_{1h,i}}{h} - k \hat{y}_{1,i+1/2} + y_{1,i+1/2}^2 \hat{y}_{2,i+1/2} + a, & i = 0, \dots, N-1, \\ \hat{y}_{2,t i+1/2} = d_2 \frac{\hat{W}_{2h,i+1} - \hat{W}_{2h,i}}{h} - y_{1,i+1/2}^2 \hat{y}_{2,i+1/2} + b, & i = 0, \dots, N-1, \end{cases} \quad (27)$$

$$y_{1,i}^0 = u_0(x_i), \quad y_{2,i}^0 = v_0(x_i), \quad i = 1, \dots, N, \quad (28)$$

$$\hat{W}_{1h,1} = \hat{W}_{2h,1} = 0, \quad (29)$$

$$\hat{W}_{1h,N} = \hat{W}_{2h,N} = 0, \quad (30)$$

где $\hat{W}_{\alpha h,i} = \hat{y}_{\alpha, \bar{x}, i+1/2} = \frac{\hat{y}_{\alpha, i+1/2} - \hat{y}_{\alpha, i-1/2}}{h}$, $\alpha = 1, 2$.

В дальнейшем подставим уравнения (29) и (30) в уравнения (27), при $i = 0$ и $i = N$ соответственно, и запишем эту схему в каноническом виде (9):

$$A_{i+1/2}^{(1)} \bar{Y}_{i+1/2}^{n+1} = B_{1i+1/2} \bar{Y}_{i-1/2}^{n+1} + B_{2i} \bar{Y}_{i+3/2}^{n+1} + A_{i+1/2}^{(2)} \bar{Y}_{i+1/2}^{n+1} + \bar{F}_{i+1/2}^n, \quad i = 1, 2, \dots, N-2, \quad (31)$$

$$A_{1/2}^{(1)} \bar{Y}_{1/2}^{n+1} = B_{2,1/2} \bar{Y}_{3/2}^{n+1} + A_{1/2}^{(2)} \bar{Y}_{1/2}^{n+1} + \bar{F}_{1/2}^n, \quad i = 0, \quad (32)$$

$$A_{N-1/2}^{(1)} \bar{Y}_{N-1/2}^{n+1} = B_{1N-1/2} \bar{Y}_{N-3/2}^{n+1} + A_{N-1/2}^{(2)} \bar{Y}_{N-1/2}^{n+1} + \bar{F}_{N-1/2}^n, \quad i = N-1, \quad (33)$$

где

$$\bar{Y}_{i+1/2}^{n+1} = \left(y_{1,i+1/2}^{n+1}, y_{2,i+1/2}^{n+1} \right)^T, \quad i = 0, \dots, N-1 - \text{неизвестная векторная функция};$$

$$\bar{F}_{i+1/2}^n = \left(y_{1,i+1/2}^n + \tau a, y_{2,i+1/2}^n + \tau b \right)^T, \quad i = 0, \dots, N-1 - \text{вектор правой части};$$

$$A_{i+1/2}^{(1)}, A_{i+1/2}^{(2)}, B_{1i+1/2}, B_{2i+1/2}, \quad i = 0, \dots, N-1 - \text{квадратные матрицы коэффициентов размеров } 2 \times 2:$$

$$A_{i+1/2}^{(1)} = \text{diag} \left\{ 1 + \frac{2\tau}{h^2} d_1 + \tau, 1 + \frac{2\tau}{h^2} d_2 + \tau \left(y_{1,i+1/2}^n \right)^2 \right\}, \quad i = 1, \dots, N-2,$$

$$A_{1/2}^{(1)} = \text{diag} \left\{ 1 + \frac{\tau}{h^2} d_1 + \tau, 1 + \frac{\tau}{h^2} d_2 + \tau (y_{1,1/2}^n)^2 \right\},$$

$$A_{N-1/2}^{(1)} = \text{diag} \left\{ 1 + \frac{\tau}{h^2} d_1 + \tau, 1 + \frac{\tau}{h^2} d_2 + \tau (y_{1,N-1/2}^n)^2 \right\},$$

$$A_{i+1/2}^{(2)} = \begin{pmatrix} 0 & \tau (y_{1,i+1/2}^n)^2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad i = 0, \dots, N-1,$$

$$B_{1,i+1/2} = \text{diag} \left\{ \frac{\tau}{h^2} d_1, \frac{\tau}{h^2} d_2 \right\}, \quad i = 1, \dots, N-1,$$

$$B_{2,i} = \text{diag} \left\{ \frac{\tau}{h^2} d_1, \frac{\tau}{h^2} d_2 \right\}, \quad i = 0, \dots, N-2.$$

Все матричные коэффициенты в схеме (31)–(33) положительные, отсюда на основе определения [8] мы приходим к следующей теореме.

Теорема 3. *Векторно-разностная схема (31)–(33) является монотонной.*

Доказательство. Эта теорема доказывается аналогичным образом, как и теорема 2.

По индукции предполагаем, что $y_{1,i+1/2}^n \geq 0, y_{2,i+1/2}^n \geq 0$, и покажем, что сеточные функции $y_{1,i+1/2}^{n+1} \geq 0, y_{2,i+1/2}^{n+1} \geq 0, i = 0, 1, \dots, N-1$.

Сначала докажем, что $y_{2,i+1/2}^{n+1} \geq 0, i = 0, \dots, N-1$. Если функция $y_{2,i+1/2}^{n+1}$ достигает минимума в какой-то внутренней точке $x_{i^0+1/2}, 1 \leq i^0 \leq N-2$, то из (31) следует

$$y_{2,i^0+1/2}^{n+1} \geq \frac{1}{1 + \tau (y_{1,i^0+1/2}^n)^2} (y_{2,i^0+1/2}^n + \tau b) \geq 0. \quad (34)$$

Если функция $y_{2,i+1/2}^{n+1}$ достигает минимума в какой-то внутренней точке $x_{1/2}$, то

$$y_{2,1/2}^{n+1} \geq \frac{1}{1 + \tau (y_{1,1/2}^n)^2} (y_{2,1/2}^n + \tau b) \geq 0. \quad (35)$$

Если функция $y_{2,i+1/2}^{n+1}$ достигает минимума в какой-то внутренней точке $x_{N-1/2}$, то

$$y_{2,N-1/2}^{n+1} \geq \frac{1}{1 + \tau (y_{1,N-1/2}^n)^2} (y_{2,N-1/2}^n + \tau b) \geq 0. \quad (36)$$

Из (34), (35), (36) получим

$$y_{2,i+1/2}^{n+1} \geq 0, \quad i = 0, \dots, N-1. \quad (37)$$

Аналогично, используя результат $y_{2,i+1/2}^{n+1} \geq 0, i = 0, \dots, N-1$, находим

$$y_{1,i+1/2}^{n+1} \geq \min_{0 \leq i \leq N-1} y_{1,i+1/2}^{n+1} \geq \frac{1}{1 + \tau} (y_{1,i+1/2}^n + \tau a) \geq 0, \quad i = 0, \dots, N-1. \quad (38)$$

Из (37) и (38) теорема доказана.

Вычислительный эксперимент 2. Теперь рассмотрим задачу (23)–(26) с входными данными из [11]: $0 \leq x \leq 3\pi; 0 \leq t \leq 100; a = (\beta - \alpha)/2; b = (\beta + \alpha)/2; \alpha = 0,02; \beta = 0,3; d_1 = 0,01; d_2 = 1; k = 1;$

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} = \frac{\partial v(x,t)}{\partial x} = 0, \quad x \in \partial\Omega, \text{ начальные функции } u_0(x) = 0,3 + 0,001 \sin x; v_0(x) = 1,778.$$

Так как входные данные положительные, то построенная схема (31)–(33) является монотонной. Полученное соответствующее численное решение без нефизических осцилляций изображено на рис. 3.

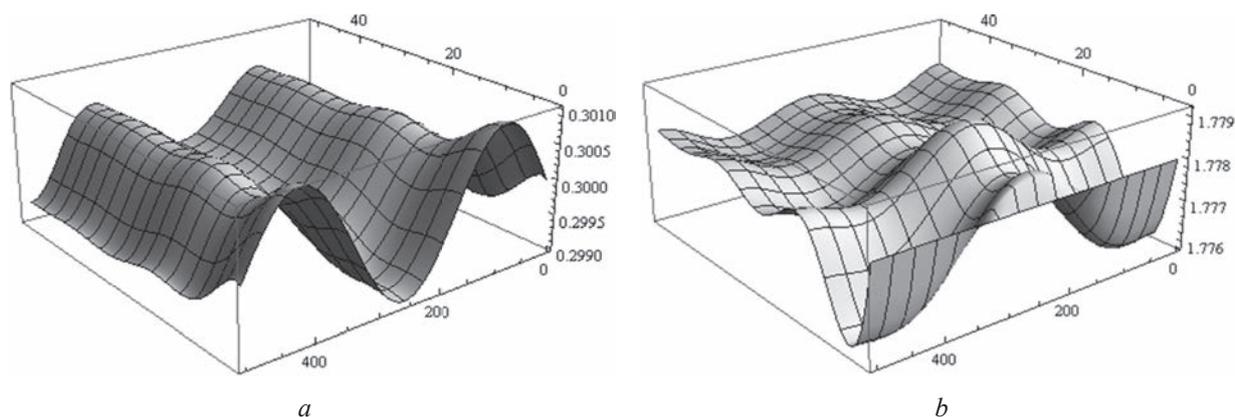


Рис. 3. Численные решения: a – для функции $u(x,t)$; b – для функции $v(x,t)$
 Fig. 3. Numerical solutions: a – of the function $u(x,t)$; b – of the function $v(x,t)$

З а м е ч а н и е. Аналогичным образом можно построить монотонную разностную схему для модели Шнэкенберг с граничными условиями смешанного типа, как это сделано в работе [1].

Благодарности

Автор выражает благодарность профессору П. П. Матусу за помощь, оказанную в работе

Acknowledgements

The author is grateful to Professor Piotr Matus for help in this work.

Список использованных источников

1. Матус, П. П. Монотонные разностные схемы для линейного параболического уравнения с граничными условиями смешанного типа / П. П. Матус, В. Т. К. Туен, Ф. Ж. Гаспар // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2014. – Т. 58, № 5. – С. 18–22.
2. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
3. Matus, P. P. The maximum principle and some its applications / P. P. Matus // Comput. Meth. Appl. Math. – 2002. – Vol. 2, N 1. – P. 50–91.
4. Матус, П. П. Монотонные разностные схемы для нелинейных параболических уравнений / П. П. Матус, И. В. Рыбак // Дифференц. уравнения. – 2003. – Т. 39, № 7.
5. Farago, I. Discrete maximum principle and adequate discretizations of linear parabolic problems / I. Farago, R. Horvath // SIAM J. Sci. Comput. – 2006. – Vol. 28, iss. 6. – P. 2313–2336.
6. Farago, I. Discrete maximum principles for nonlinear parabolic pde systems / I. Farago, J. Karatson, S. Korotov // IMA J. Numerical Analysis. – 2012. – Vol. 32, iss. 4. – P. 1541–1573.
7. Francisco, J. Numerical methods for a one-dimensional non-linear Biot's model / J. Francisco [et al.] // Comp. Appl. Math. – 2016. – Vol. 293. – P. 62–72.
8. Гаспар, Ф. Ж. Монотонные разностные схемы для систем эллиптических и параболических уравнений / Ф. Ж. Гаспар, П. П. Матус, В. Т. К. Туен, Л. М. Хиуе // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2016. – Т. 60, № 5. – С. 29–33.
9. Murray, J. D. Mathematical Biology / J. D. Murray – 2nd ed. – Berlin: Springer-Verlag, 1993.
10. Saad A. Manaa. Some numerical methods for Schnackenberg model / Saad A. Manaa // Int. J. Engineering Inventions. – 2013. – Vol. 2, iss. 2. – P. 71–78.
11. Liu, P. Bifurcation analysis of reaction-diffusion Schnackenberg model / P. Liu // J. Math. Chem. – 2013. – Vol. 51, iss. 8. – P. 2001–2019.
12. Mitidieri, E. Weakly couple elliptic systems and positivity / E. Mitidieri, G. Sweer // Mathematische Nachrichten. – 1995. – Vol. 173, iss. 1. – P. 259–286.
13. Saad A. Manaa. Numerical Solution of Brusselator Model by Finite Difference Method / Saad A. Manaa, Rostam K. Saeed, Fadhil H. Easif // J. App. Sci. Research. – 2010. – Vol. 6 (11). – P. 1632–1646.

References

1. Matus P.P., Tuyen V., Gaspar F. Monotone difference schemes for linear parabolic equation with mixed boundary conditions. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2014, vol. 58, no. 5, pp. 18–22. (in Russian)
2. Samarskiy A.A. *The theory of difference schemes*. Moscow, Nauka, 1977. 656 p. (in Russian)
3. Matus P.P. The maximum principle and some its applications. *Computational Methods in Applied Mathematics*, 2002, vol. 2, no. 1, pp. 50–91. doi: 10.2478/cmam-2002-0004.
4. Matus P.P., Rybak I.V. Monotone difference schemes for nonlinear parabolic equations. *Differential equations*, 2003, vol. 39, no. 7, pp. 1013–1022. doi: 10.1023/B:DIEQ.0000009197.94879.5c.

5. Farago I., Horvath R. Discrete maximum principle and adequate discretizations of linear parabolic problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2006, vol. 28, no. 6, pp. 2313–2336. doi:10.1137/050627241.
6. Farago I., Karatson J., Korotov S. Discrete maximum principles for nonlinear parabolic pde systems. *IMA Journal of Numerical Analysis*, 2012, vol. 32, no. 4, pp. 1541–1573. doi: 10.1093/imanum/drr050.
7. Gaspar F.J., Lisbona F.J., Matus P., Tuyen V. T. K. Numerical methods for a one-dimensional non-linear Biot's model. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2016, vol. 293, pp. 62–72. doi:10.1016/j.cam.2015.03.039.
8. Gaspar F.J., Matus P., Tuyen V. T. K., Hieu L.M. Monotone difference schemes for systems of elliptic and parabolic equations systems. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2016, vol. 60, no. 5, pp. 29–33. (in Russian)
9. Murray J.D. *Mathematical Biology*. 2nd ed. Springer-Verlag Berlin, 1993.
10. Manaa S.A. Some numerical methods for Schnackenberg model. *International Journal of Engineering Inventions*, 2013, vol. 2, no. 2, pp. 71–78.
11. Liu P., Shi J., Wang Y., Feng X. Bifurcation analysis of reaction–diffusion Schnackenberg model. *Journal of Mathematical Chemistry*, 2013, vol. 51, no. 8, pp. 2001–2019. doi: 10.1007/s10910-013-0196-x.
12. Mitidieri E., Sweer G. Weakly coupled elliptic systems and positivity. *Mathematische Nachrichten*, 1995, vol. 173, no. 1, pp. 259–286. doi: 10.1002/mana.19951730115.
13. Manaa S.A., Saeed R.K., Easif F.H. Numerical Solution of Brusselator Model by Finite Difference Method. *Journal of Applied Sciences Research*, 2010, vol. 6, no. 11, pp. 1632–1646.

Информация об авторе

Во Тхи Ким Туен – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vokimtuyen188@gmail.com

Для цитирования

Во Тхи Ким Туен. Монотонные разностные схемы для модели Шнэкенберг / Во Тхи Ким Туен // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 38–46.

Information about the author

Vo Thi Kim Tuyen – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus); the teacher, Hue Industrial College (Hue, Vietnam). E-mail: vokimtuyen188@gmail.com

For citation

Vo Thi Kim Tuyen. Monotone difference schemes for the Schnackenberg model. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 38–46. (in Russian)

Ле Минь Хиеу

*Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь
Экономический университет – Университет Дананга, Дананг, Вьетнам*

БЕЗУСЛОВНО МОНОТОННЫЕ РАЗНОСТНЫЕ СХЕМЫ ВТОРОГО ПОРЯДКА АППРОКСИМАЦИИ НА РАВНОМЕРНЫХ СЕТКАХ ДЛЯ ГАММА-УРАВНЕНИЯ

В настоящей работе рассмотрена начально-краевая задача для так называемого Гамма-уравнения, которое может быть получено преобразованием нелинейного уравнения Блэка – Шоулза для опционной цены в квазилинейное параболическое уравнение для второй производной опционной цены, и получены двусторонние оценки для его точного решения. На основании принципа регуляризации полученные ранее результаты обобщаются на построение безусловно монотонных разностных схем (принцип максимума выполнен без ограничений на соотношения между коэффициентами и параметрами сетки) второго порядка локальной аппроксимации на равномерных сетках для данного уравнения. С помощью разностного принципа максимума получены двусторонние оценки для разностного решения при произвольных незнакомостоянных входных данных задачи. Доказана априорная оценка в норме C . Отметим, что доказанные двусторонние оценки разностного решения полностью согласованы с дифференциальной задачей и максимальное и минимальное значения разностного решения не зависят от коэффициентов диффузии и конвекции. Приведенные в работе вычислительные эксперименты подтверждают теоретические выводы.

Ключевые слова: Гамма-уравнение, принцип максимума, двусторонние оценки, монотонная разностная схема, квазилинейное параболическое уравнение.

Le Minh Hieu

*Belarusian State University, Minsk, Belarus
University of Economics – University of Da Nang, Da Nang, Vietnam*

UNCONDITIONALLY MONOTONE FINITE DIFFERENCE SCHEME OF THE SECOND-ORDER APPROXIMATION ON UNIFORM GRIDS FOR THE GAMMA EQUATION

In this article we consider the initial boundary-value problem for the so-called Gamma equation, which can be derived by transforming the nonlinear Black – Scholes equation for option price into a quasi-linear parabolic equation for the second derivative of option price, and for its exact solution the two-side estimates are obtained. By means of the regularization principle, the previous results are generalized to construct an unconditionally monotone finite-difference scheme (the maximum principle is satisfied without limitations on the relations between the coefficients and the grid parameters) of second-order approximation on uniform grids for this equation. With the help of the difference maximum principle, the two-side estimates for a difference solution are obtained using the arbitrary non-sign-constant input data of the problem. The *a priori* estimate in the maximum norm C is proved. It is interesting to note that the proven two-side estimates for the difference solution are fully consistent with the differential problem, and the maximal and minimal values of the difference solution do not depend on the diffusion and convection coefficients. Computational experiments confirming the theoretical conclusions are given.

Keywords: Gamma equation, maximum principle, two-side estimates, monotone finite-difference scheme, quasi-linear parabolic equation.

Введение. Принцип максимума с успехом применяется для доказательства существования и единственности решения начально-краевых задач для параболических и эллиптических уравнений. В отличие от метода энергетических неравенств он позволяет устанавливать априорные оценки решения в наиболее сильной равномерной норме для задач произвольной размерности с несамосопряженным эллиптическим оператором [1].

Аналогичный математический аппарат используется и в теории разностных схем [2] для исследования устойчивости и сходимости разностного решения в равномерной норме. Вычислительные методы, удовлетворяющие принципу максимума, принято называть монотонными [2]. Монотонные схемы играют важную роль в вычислительной практике. Они позволяют получать численное решение без осцилляций даже в случае негладких решений [3].

Не менее важными являются и нижние оценки решения дифференциально-разностных задач или в общем случае – двусторонние оценки решения задачи. Отметим также, что при формулировке сеточного принципа максимума обычно требуется знакоопределенность входных данных задачи. В работах [4, 5] для так называемой канонической формы записи разностной схемы общего вида [2] при обычных условиях положительности коэффициентов уравнения получены двусторонние оценки сеточного решения при произвольных незнакомостоянных входных данных задачи. Двусторонние оценки особенно важны при исследовании теоретических свойств вычислительных методов, аппроксимирующих задачи с неограниченной нелинейностью, когда нужно доказывать принадлежность сеточного решения окрестности значений точного решения. В качестве примера можно привести Гамма-уравнение, используемое при описании опционной цены в финансовой математике [6, 9]. В связи с этим представляет интерес статья [7], в которой получены двусторонние оценки для решения разностной схемы, аппроксимирующей задачу Дирихле для линейного параболического уравнения в дискретном и непрерывном случаях.

В настоящей работе рассмотрено Гамма-уравнение и на основе результатов из [8] приведены двусторонние оценки для его точного решения. Полученные ранее результаты обобщаются на построение безусловно монотонных разностных схем второго порядка локальной аппроксимации на равномерных сетках для данного уравнения. Построение таких схем при соответствующем выборе возмущенного коэффициента проводится подобно [2, 4, 5]. С помощью разностного принципа максимума получены двусторонняя и априорная оценки в норме C для разностного решения. Отметим, что доказанные двусторонние оценки разностного решения полностью согласованы с дифференциальной задачей.

1. Постановка задачи. В прямоугольнике $\bar{Q}_T = \{(x,t): l_1 \leq x \leq l_2, 0 \leq t \leq T\}$ рассмотрим следующую начально-краевую задачу для квазилинейного параболического уравнения, называемого Гамма-уравнением [6, 9]:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 \beta(u)}{\partial x^2} + \frac{\partial \beta(u)}{\partial x} + c \frac{\partial u}{\partial x}, \quad u = u(x,t), \quad c = \text{const}, \quad (1)$$

с однородными граничными

$$u(l_1, t) = u(l_2, t) = 0, \quad t > 0, \quad (2)$$

и начальными условиями

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad l_1 \leq x \leq l_2. \quad (3)$$

Уравнение (1) может быть записано в виде

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + r(u) \frac{\partial u}{\partial x}, \quad (4)$$

с коэффициентами

$$k(u) = \beta'(u), \quad r(u) = k(u) + c. \quad (5)$$

Предполагаем выполнение условия параболичности уравнения (4) на решении [10]:

$$0 < k_1 \leq k(u) \leq k_2, \quad \forall u \in \bar{D}_u, \quad k_1, k_2 = \text{const}, \quad (6)$$

где

$$\bar{D}_u = \{u(x,t): m_1 \leq u(x,t) \leq m_2, (x,t) \in \bar{Q}_T\}.$$

Далее предполагаем, что решение задачи (1)–(3) существует и единственно, а все входящие в уравнение (4) коэффициенты и искомая функция обладают непрерывными ограниченными производными, необходимыми по ходу изложения порядка.

2. Вспомогательные результаты. Пусть в n -мерном евклидовом пространстве задано конечное количество точек – сетка Ω_h . Каждой точке $x \in \Omega_h$ поставим в соответствие один и только один шаблон $M(x)$ – любое подмножество Ω_h , содержащее данную точку. Окрестностью точки x

назовем множество $M'(x) = M(x) \setminus x$. Пусть заданы функции $A(x)$, $B(x, \xi)$, $F(x)$, определенные при любых $x \in \Omega_h$, $\xi \in \Omega_h$ и принимающие вещественные значения. Далее, каждой точке $x \in \Omega_h$ соответствует одно и только одно уравнение вида [2]:

$$A(x)y(x) = \sum_{\xi \in M'(x)} B(x, \xi)y(\xi) + F(x), \quad x \in \Omega_h, \quad (7)$$

называемое канонической формой записи разностной схемы. Так как любая разностная схема может быть записана в виде (7), то под монотонностью понимают выполнение условий положительности на коэффициенты уравнений

$$A(x) > 0, \quad B(x, \xi) > 0, \quad \forall \xi \in M'(x), \quad (8)$$

$$D(x) = A(x) - \sum_{\xi \in M'(x)} B(x, \xi) > 0, \quad \forall \xi \in M'(x). \quad (9)$$

Для решения разностной задачи (7) при выполнении условий положительности коэффициентов (8)–(9) на основе сеточного принципа максимума без предположений на знакоопределенность входных данных $F(x)$ доказаны следующие важные двусторонние оценки.

Лемма [4, 5]. Пусть выполнены условия положительности коэффициентов (8)–(9). Тогда максимальное и минимальное значения решения разностной схемы (7) принадлежат интервалу изменения входных данных

$$\min_{x \in \Omega_h} \frac{F(x)}{D(x)} \leq y(x) \leq \max_{x \in \Omega_h} \frac{F(x)}{D(x)}, \quad x \in \Omega_h. \quad (10)$$

Следствие [2]. Пусть выполнены условия леммы. Тогда для решения разностной задачи (7) имеет место оценка в сеточном аналоге нормы C

$$\|y\|_C = \max_{x \in \Omega_h} |y(x)| \leq \left\| \frac{F}{D} \right\|_C.$$

3. Двусторонние оценки для дифференциальной задачи. На основе результатов из [8] доказываем двусторонние оценки для точного решения задачи (1)–(3).

Теорема 1. Пусть выполнено условие (6). Тогда для решения $u(x, t)$ задачи (1)–(3) справедливы следующие двусторонние оценки:

$$\min \left\{ 0, \min_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\} \leq u(x, t) \leq \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\}. \quad (11)$$

Доказательство. Для доказательства (11) сделаем преобразование функции $u(x, t)$ к новой функции $v(x, t)$, связанной с ней равенством

$$u(x, t) = v(x, t)e^{\lambda t},$$

где λ – пока произвольное число. Функция $v(x, t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial v}{\partial t} + \lambda v - k \left(v e^{\lambda t} \right) \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - \frac{\partial k \left(v e^{\lambda t} \right)}{\partial x} \frac{\partial v}{\partial x} - r \left(v e^{\lambda t} \right) \frac{\partial v}{\partial x} = 0, \quad (12)$$

с начальными и граничными условиями

$$v(x, 0) = u_0(x), \quad l_1 \leq x \leq l_2, \quad (13)$$

$$v(l_1, t) = v(l_2, t) = 0, \quad t > 0. \quad (14)$$

Пусть максимум решения $v(x,t)$ задачи (12)–(14) достигается в некоторой точке $(x_0, t_0) \in (l_1, l_2) \times (0, T]$:

$$\max_{(x,t) \in \bar{Q}_T} v(x,t) = v(x_0, t_0),$$

причем в точке (x_0, t_0) выполнены соотношения

$$\begin{aligned} \frac{\partial v(x_0, t_0)}{\partial t} &\geq 0, \quad \frac{\partial v(x_0, t_0)}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial^2 v(x_0, t_0)}{\partial x^2} &= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{v(x_0 - \Delta x, t_0) - 2v(x_0, t_0) + v(x_0 + \Delta x, t_0)}{\Delta x^2} \leq 0, \end{aligned}$$

и уравнение (12). Из этого следует, что

$$v(x,t) \leq v(x_0, t_0) \leq 0, \quad \lambda > 0. \tag{15}$$

Если наибольшее в \bar{Q}_T значение $v(x,t)$ принимается на границе $\{l_1, l_2\} \times (0, T] \cup [l_1, l_2] \times \{0\}$, то получаем

$$v(x,t) \leq \max_{(x,t) \in \bar{Q}_T} v(x,t) = \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\}. \tag{16}$$

Тогда во всех случаях (15)–(16) справедлива оценка

$$v(x,t) \leq \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\},$$

из которой следует

$$u(x,t) \leq e^{\lambda T} \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\}, \quad \lambda > 0.$$

Когда $\lambda \rightarrow 0$, получаем правую часть неравенств (11). Аналогично доказывается и случай минимума решения $u(x,t)$. Теорема доказана.

4. Безусловно монотонная разностная схема второго порядка аппроксимации на равномерных сетках для Гамма-уравнения. С помощью принципа регуляризации [2] уравнение (4) на обычной равномерной сетке по пространству и времени

$$\begin{aligned} \bar{\omega} &= \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau, \quad \bar{\omega}_h = \{x_i = ih, i = \overline{0, N}, hN = l\}, \quad \bar{\omega}_h = \omega_h \cup \{x_0 = 0, x_N = l\}, \\ \bar{\omega}_\tau &= \{t_n = n\tau, n = \overline{0, N_0}, \tau N_0 = T\}, \quad \bar{\omega}_\tau = \omega_\tau \cup \{t_{N_0} = T\} \end{aligned}$$

аппроксимируем разностной схемой вида

$$\begin{aligned} \frac{y_i^{n+1} - y_i^n}{\tau} &= \frac{\kappa_i^n(y)}{h} \left(a_{i+1}^{n+1}(y) \frac{y_{i+1}^{n+1} - y_i^{n+1}}{h} - a_i^n(y) \frac{y_i^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{h} \right) + \\ &+ b_i^+(y) a_{i+1}^n(y) \frac{y_{i+1}^{n+1} - y_i^{n+1}}{h} + b_i^-(y) a_i^n(y) \frac{y_i^{n+1} - y_{i-1}^{n+1}}{h}, \tag{17} \\ y_i^0 &= u_0(x_i), \quad y_0^{n+1} = y_N^{n+1} = 0, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \kappa_i^n(y) &= (1 + R_i^n(y))^{-1}, \quad R_i^n(y) = 0, 5h \left| r(y_i^n) \right| / k(y_i^n) \geq 0, \\ b_i^+(y) &= r^+(y_i^n) / k(y_i^n) \geq 0, \quad b_i^-(y) = r^-(y_i^n) / k(y_i^n) \leq 0, \end{aligned}$$

$$r^+(y_i^n) = 0,5 \left(r(y_i^n) + |r(y_i^n)| \right) \geq 0, \quad r^-(y_i^n) = 0,5 \left(r(y_i^n) - |r(y_i^n)| \right) \leq 0,$$

$$a_{i+1}^n(y) = 0,5 \left(k(y_{i+1}^n) + k(y_i^n) \right), \quad a_i^n(y) = 0,5 \left(k(y_{i-1}^n) + k(y_i^n) \right).$$

Погрешность аппроксимации. Погрешность аппроксимации схемы (17) вычисляется по следующей формуле:

$$\psi = -u_t + \kappa(u) \left(a(u) \hat{u}_{\bar{x}} \right)_x + b^+(u) a^{(+1)}(u) \hat{u}_x + b^-(u) a(u) \hat{u}_{\bar{x}}, \quad (18)$$

где

$$v = v^n = v(t_n), \quad \hat{v} = v^{n+1} = v(t_{n+1}), \quad v_x = (v_{i+1} - v_i) / h,$$

$$v_{\bar{x}} = (v_i - v_{i-1}) / h, \quad a^{(+1)}(u) = a_{i+1}(u), \quad a(u) = a_i(u).$$

Учитывая, что

$$b^+(u) = r^+(u) / k(u), \quad b^-(u) = r^-(u) / k(u),$$

$$r^+(u) + r^-(u) = r(u), \quad r^+(u) - r^-(u) = |r(u)|,$$

$$u_t = \frac{\partial u}{\partial t} + O(\tau), \quad \left(a(u) \hat{u}_{\bar{x}} \right)_x = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(h^2 + \tau),$$

$$a^{(+1)}(u) \hat{u}_x = k(u) \frac{\partial u}{\partial x} + 0,5h \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(h^2 + \tau),$$

$$a(u) \hat{u}_{\bar{x}} = k(u) \frac{\partial u}{\partial x} - 0,5h \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(h^2 + \tau),$$

получаем, что

$$b^+(u) a^{(+1)}(u) \hat{u}_x + b^-(u) a(u) \hat{u}_{\bar{x}} = r(u) \frac{\partial u}{\partial x} + R(u) \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(h^2 + \tau).$$

Тогда из (18) имеем

$$\psi = \frac{(R(u))^2}{1 + R(u)} \frac{\partial}{\partial x} \left(k(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + O(h^2 + \tau) = O(h^2 + \tau).$$

Таким образом, разностная схема (17) имеет второй порядок аппроксимации по пространственной переменной и первый – по временной.

Монотонность, двусторонние оценки и априорная оценка в норме C. Данная разностная схема (17) записывается в виде (7)

$$A_i^n y_{i-1}^{n+1} - C_i^n y_i^{n+1} + B_i^n y_{i+1}^{n+1} = -F_i^n, \quad i = 1, 2, \dots, N-1, \quad (19)$$

$$y_0^{n+1} = y_N^{n+1} = 0, \quad (20)$$

с коэффициентами, определяемыми следующим образом:

$$A_i^n = \frac{\tau}{h^2} a_i^n(y) \left(\kappa_i^n(y) - h b_i^-(y) \right), \quad B_i^n = \frac{\tau}{h^2} a_{i+1}^n(y) \left(\kappa_i^n(y) + h b_i^+(y) \right),$$

$$C_i^n = 1 + A_i^n + B_i^n, \quad F_i^n = y_i^n, \quad D_i^n = C_i^n - A_i^n - B_i^n = 1, \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Схема (19)–(20) является монотонной, если выполнены условия положительности коэффициентов (8)–(9) [2], т. е.

$$A_i^n > 0, \quad B_i^n > 0, \quad D_i^n = C_i^n - A_i^n - B_i^n > 0.$$

Нам нужно доказать, что $a_i^n(y) > 0$ для всех i, n . Действительно, когда $n = 0$, очевидно, что $a_i^0(y) = 0,5(k(u_{0i}) + k(u_{0i-1})) > 0$. Предположим, что для произвольного n тоже верно неравенство $a_i^n(y) > 0$. Тогда из этого предположения имеем $A_i^n > 0, B_i^n > 0, C_i^n > 0$. По лемме на основании оценки (10) для произвольного $t = t_n = \omega_\tau$ и всех $i = 0, 1, \dots, N$ имеем

$$\min \left\{ 0, \min_{1 \leq i \leq N-1} y_i^n \right\} \leq y_i^{n+1} \leq \max \left\{ 0, \max_{1 \leq i \leq N-1} y_i^n \right\}. \quad (21)$$

Используя индукцию по n , из (21) получаем двусторонние оценки через входные данные без предположения о знакоопределенности входных данных:

$$\min \left\{ 0, \min_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\} \leq y_i^{n+1} \leq \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\}, \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (22)$$

Из (22) получаем $y_i^{n+1} \in \bar{D}_u$, т. е. $a_i^{n+1}(y) = 0,5(k(y_i^{n+1}) + k(y_{i-1}^{n+1})) > 0$. Так как выполнены все условия положительности коэффициентов (8)–(9), то схема (19)–(20) монотонна при любых h и τ (безусловная монотонность). Следовательно, доказана следующая

Теорема 2. Пусть выполнено условие (6). Тогда разностная схема (19)–(20) безусловно монотонна и для ее решения $y \in \bar{D}_u$ верны двусторонние оценки (22).

На основании принципа максимума обычным образом устанавливается и априорная оценка в норме C .

Теорема 3. При выполнении условия (6) для разностной схемы (19)–(20) справедлива априорная оценка

$$\|y^n\|_{\bar{C}} \leq \|u_0\|_{\bar{C}}.$$

Доказательство. Так как все коэффициенты схемы удовлетворяют неравенствам (8)–(9), то по следствию имеем $\|y^{n+1}\|_{\bar{C}} \leq \|y^n\|_{\bar{C}}$. В итоге, находим цепочку соотношений

$$\|y^{n+1}\|_{\bar{C}} \leq \|y^n\|_{\bar{C}} \leq \|y^{n-1}\|_{\bar{C}} \leq \dots \leq \|u_0\|_{\bar{C}}.$$

Теорема доказана.

З а м е ч а н и е 1. Максимальное и минимальное значения разностного решения не зависят от коэффициентов диффузии $k(u)$ и конвекции $r(u)$.

З а м е ч а н и е 2. Для случая $c = 0$ уравнение (1) может быть записано в виде

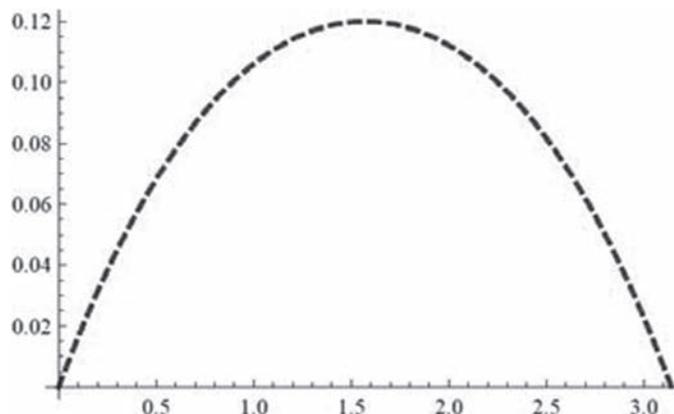
$$\frac{\partial u}{\partial t} = e^{-x} \frac{\partial}{\partial x} \left(\bar{k}(x, u) \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad \bar{k}(x, u) = e^x k(u), \quad k(u) = \beta'(u).$$

Тогда при построении для него монотонных разностных схем нам не нужно использовать принцип регуляризации.

З а м е ч а н и е 3. Полученные в (22) двусторонние оценки полностью согласованы с дифференциальной задачей (11).

Пример функции $\beta(u)$. Для случая модели Frey [6] $\beta(u) = u/(1-\rho u)^2$, $\rho > 0$ из (5) получаем коэффициент $k(u)$ вида $k(u) = (1+\rho u)/(1-\rho u)^3$. Тогда в силу (6) уравнение (1) будет параболическим, если $k(u) > 0, \forall u \in \bar{D}_u$, т. е. если

$$-\frac{1}{\rho} < u(x, t) < \frac{1}{\rho}. \quad (23)$$



Численное решение при $t = 1$ с шагом $h = \pi/31 \approx 0,1$ и $\tau = 0,1$
 Numerical solution at $t = 1$ with step $h = \pi/31 \approx 0.1$ and $\tau = 0.1$

Очевидно, что для решения разностной схемы (19)–(20), аппроксимирующей задачу (1)–(3), условия (23) выполнены, так как по теореме 2 для всех $i = 0, 1, 2, \dots, N$, $n = 0, 1, 2, \dots, N_0$ имеем

$$-\frac{1}{\rho} < \min \left\{ 0, \min_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\} \leq y_i^n \leq \max \left\{ 0, \max_{l_1 \leq x \leq l_2} u_0(x) \right\} < \frac{1}{\rho}.$$

5. Вычислительный эксперимент. Рассмотрим частный случай Гамма-уравнения с однородными граничными условиями

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1+u}{(1-u)^3} \frac{\partial u}{\partial x} \right), \quad 0 < x < \pi, \quad 0 < t \leq 1, \quad (24)$$

$$u(x, 0) = \sin x, \quad u(0, t) = u(\pi, t) = 0. \quad (25)$$

Коэффициент $k(u) = (1+u)/(1-u)^3$ не определен при $u = 1$, т. е. он не определен с начальным условием $u_0(x) = \sin x$ при $x = x^* = \pi/2$. Поэтому построим равномерную сетку с шагом $h = \pi/(2N+1)$, чтобы $x_i \neq x^*$. На рисунке показан график приближенных решений задачи (24)–(25) при $t = 1$, полученных с использованием разностной схемы (19)–(20) с шагом $h = \pi/31 \approx 0,1$ и $\tau = 0,1$.

З а м е ч а н и е 4. При $x = x^*$ для случая Гамма-уравнения (24)–(25) численное решение не определяется. Решение, приведенное на рисунке, не является математически правильным, так как решение задачи (24)–(25) не определено при таком выборе начального условия. Следовательно, очень важно строить сеточную область таким образом, чтобы точки экстремума входных данных попадали в узлы сетки.

Благодарности

Автор выражает благодарность профессору П. П. Матусу за помощь, оказанную в данной работе.

Acknowledgments

The author is very grateful to Professor P. P. Matus for help in this work.

Список использованных источников

1. Владимиров, В. С. Уравнения математической физики / В. С. Владимиров. – М.: Наука, 1981. – 512 с.
2. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1989. – 656 с.
3. Матус, П. П. Монотонные разностные схемы для линейного параболического уравнения с граничными условиями смешанного типа / П. П. Матус, В. Т. К. Туен, Ф. Гаспар // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2014. – Т. 58, № 5. – С. 18–22.
4. Матус, П. П. Принцип максимума для разностных схем с знакопостоянными входными данными / П. П. Матус, Л. М. Хиеу, Л. Г. Волков // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2015. – Т. 59, № 5, – С. 13–17.
5. Matus, P. P. Analysis of second order difference schemes on non-uniform grids for quasilinear parabolic equations / P. P. Matus, L. M. Hieu, L. G. Volkov // J. Comput. Appl. Math. – 2017. – Vol. 310. – P. 186–199.

6. Koleva, M. N. A second-order positivity preserving numerical method for Gamma equation / M. N. Koleva, L. G. Vulkov // *Appl. Math. Comput.* – 2013. – Vol. 220. – P. 722–734.
7. Farago, I. Discrete maximum principle and adequate discretizations of linear parabolic problems / I. Farago, R. Horvath // *SIAM J. Sci. Comput.* – 2006. – Vol. 28, N 6. – P. 2313–2336.
8. Ладыженская, О. А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О. А. Ладыженская, В. А. Солонников, Н. Н. Уралцева. – М.: Наука, 1967. – 736 с.
9. Jandacka, M. On the risk-adjusted pricing-methodology-based valuation of vanilla options and explanation of the volatility smile / M. Jandacka, D. Sevcovic // *J. Appl. Math.* – 2005. – Vol. 3. – P. 235–258.
10. Фридман, А. Уравнения с частными производными параболического типа / А. Фридман. – Москва: Мир, 1968. – 428 с.

References

1. Vladimirov V.S. *Equations of mathematical physics*. Moscow, Nauka, 1981. 512 p. (in Russian)
2. Samarskiy A.A. *The theory of difference schemes*. Moscow, Nauka, 1989. 656 p. (in Russian)
3. Matus P.P., Tyuen V.T.K., Gaspar F. Monotone difference schemes for linear parabolic equation with boundary conditions of the mixed kind. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2014, vol. 58, no. 5, pp. 18–22. (in Russian)
4. Matus P.P., Hieu L.M., Volkov L.G. The maximum principle for finite-difference schemes with non-sign-constant input data. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 2015, vol. 59, no. 5, pp. 13–17. (in Russian)
5. Matus P.P., Hieu L.M., Volkov L.G. Analysis of second order difference schemes on non-uniform grids for quasilinear parabolic equations. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2017, vol. 310, pp. 186–199. doi: 10.1016/j.cam.2016.04.006.
6. Koleva M.N., Vulkov L.G. A second-order positivity preserving numerical method for Gamma equation. *Applied Mathematics and Computation*, 2013, vol. 220, pp. 722–734. doi: 10.1016/j.amc.2013.06.082.
7. Farago I., Horvath R. Discrete maximum principle and adequate discretizations of linear parabolic problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 2006, vol. 28, no. 6, pp. 2313–2336. doi:10.1137/050627241.
8. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. *Linear and quasilinear equations of parabolic type*. Moscow, Nauka, 1967. 736 p. (in Russian)
9. Jandacka M., Sevcovic D. On the risk-adjusted pricing-methodology-based valuation of vanilla options and explanation of the volatility smile. *Journal of Applied Mathematics*, 2005, no. 3, pp. 235–258. doi: 10.1155/JAM.2005.235.
10. Fridman A. *Partial differential equations of parabolic type*. Moscow, Mir Publishers, 1968. 428 p. (in Russian)

Информация об авторе

Ле Минь Хиеу – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: lmhieuktdn@gmail.com

Information about the author

Le Minh Hieu – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: lmhieuktdn@gmail.com

Для цитирования

Ле Минь Хиеу. Безусловно монотонные разностные схемы второго порядка аппроксимации на равномерных сетках для Гамма-уравнения / Ле Минь Хиеу // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 47–54.

For citation

Le Minh Hieu. Unconditionally monotone finite difference scheme of the second-order approximation on uniform grids for the Gamma equation. *Vesti Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 47–54. (in Russian)

С. С. Каянович

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь,

КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ СТЕРЖНЕВОГО ТЕЧЕНИЯ В КАНАЛЕ

В статье [1] доказано существование решений модели стержневого течения на каждом временном слое $t_m = m\tau$, $m = 0, 1, \dots, M$. В данной работе получены априорные оценки этих решений, которые не зависят от τ и позволяют выполнить предельный переход при $\tau \rightarrow 0$.

Ключевые слова: разрешимость, предельный переход, априорные оценки, гладкость, срезающая функция.

S. S. Kayanovich

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus,

BOUNDARY-VALUE PROBLEM FOR PLUG FLOW IN THE CHANNEL

In the article [1], we have proved the existence of solutions for a model of plug flow at each time step $t_m = m\tau$, $m = 0, 1, \dots, M$. In this article, *a priori* estimates of these solutions have been obtained, which do not depend on τ and allow passing to the limit as $\tau \rightarrow 0$.

Keywords: solvability, passage to the limit, *a priori* estimates, smoothness, cut-off function.

Введение. Исследование вопроса о разрешимости модели стержневого течения было начато в работе [1]. Пространство изменения переменных (x, t) разбивалось плоскостями $t_m = m\tau$ на слои, производная по времени, которая присутствует в одном из уравнений, заменялась разностной производной, и доказывалось (при достаточно малом τ) однозначная разрешимость полученной системы на каждом временном слое.

Чтобы доказать разрешимость рассматриваемой системы в пространстве (x, t) , необходимо обосновать возможность выполнения предельного перехода при $\tau \rightarrow 0$. Для этого в данной работе устанавливаются априорные оценки самого решения краевой задачи и его производных первого и второго порядков. В случае одного уравнения краевые задачи исследовались рядом авторов [2–9]. В настоящей статье рассматривается система из трех уравнений, для одного из которых оказались полезными способы исследования, подобные тем, что были применены в вышеуказанных работах.

Отметим, что константы, которые появляются в ходе исследования и ограничивают модули самого решения и его производных, не зависят от τ и не будут увеличиваться при $\tau \rightarrow 0$. Для того чтобы данную статью можно было читать без обращения к [1], здесь сохранен необходимый минимум информации из указанной работы, но при этом внесены изменения: функция ζ теперь обозначается ζ' , константа $\beta - \beta_1$. Также усилены требования к гладкости функций: если в [1] полагалось $l \geq 3$, то теперь $l \geq 5$.

Постановка задачи. Примем следующие обозначения: $x = (x_1, x_2)$, $0 \leq x_1 \leq L$, $0 \leq x_2 \leq H$, $0 \leq t \leq T$, $\Omega = (0, L) \times (0, H)$, $S_1 = [0 \leq x_1 \leq L, x_2 = 0]$, $S_2 = [0 \leq x_1 \leq L, x_2 = H]$, $S_{iT} = S_i \times [0, T]$, $i = 1, 2$, $S_3 = [x_1 = 0, 0 \leq x_2 \leq H]$, $S_4 = [x_1 = L, 0 \leq x_2 \leq H]$, $S = S_1 \cup S_2 \cup S_3 \cup S_4$ – граница Ω , $\bar{\Omega} = \Omega \cup S$, $\Omega_T = \Omega \times (0, T]$, $S_T = S \times [0, T]$, $\bar{\Omega}_T = \bar{\Omega} \times [0, T]$, $\tilde{\Omega}$ – область, ограниченная кривой \tilde{S} , $\tilde{\Omega} = \tilde{\Omega} \cup \tilde{S}$, $\tilde{S} = \tilde{S}_1 \cup \tilde{S}_2 \cup \tilde{S}_3 \cup \tilde{S}_4$,

$$\text{где } \tilde{S}_1 = \left[0 \leq x_1 \leq \frac{\delta}{2}, x_2 = \theta_1(x_1) \right] \cup \left[\frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L - \frac{\delta}{2}, x_2 = 0 \right] \cup \left[L - \frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L, x_2 = \varphi_1(x_1) \right],$$

$$\tilde{S}_2 = \left[0 \leq x_1 \leq \frac{\delta}{2}, x_2 = \theta_2(x_1) \right] \cup \left[\frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L - \frac{\delta}{2}, x_2 = H \right] \cup \left[L - \frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L, x_2 = \varphi_2(x_1) \right],$$

$$\begin{aligned} \tilde{S}_3 &= [x_1 = 0, \theta_1(0) \leq x_2 \leq \theta_2(0)], \quad \tilde{S}_4 = [x_1 = L, \varphi_1(L) \leq x_2 \leq \varphi_2(L)], \quad \tilde{\Omega}_T = \tilde{\Omega} \times [0, T], \quad \tilde{S}_T = \tilde{S} \times [0, T], \\ \bar{\tilde{\Omega}}_T &= \bar{\tilde{\Omega}} \times [0, T], \quad \Omega_1 = [0 \leq x_1 \leq L, 0 < x_2 \leq \varepsilon], \quad \Omega_2 = [0 \leq x_1 \leq L, H - \varepsilon \leq x_2 < H], \\ \Omega_{iT} &= \Omega_i \times [0, T], \quad i = 1, 2, \quad \Omega' = [0 \leq x_1 \leq L, \varepsilon_1 < x_2 < H - \varepsilon_1], \quad \Omega'_T = \Omega' \times [0, T], \quad \varepsilon_1 = \frac{\varepsilon}{2}, \\ S'_1 &= [0 \leq x_1 \leq L, x_2 = \varepsilon_1], \quad S'_2 = [0 \leq x_1 \leq L, x_2 = H - \varepsilon_1], \quad S'_{iT} = S'_i \times [0, T], \quad i = 1, 2, \\ \theta_i(x_1), \varphi_i(x_1), \quad (i = 1, 2) &- \text{строго монотонные функции. Пусть, кроме того,} \\ \theta_1(0) = \varphi_1(L) = \varepsilon_1, \quad \theta_2(0) = \varphi_2(L) = H - \varepsilon_1, \quad \theta_1\left(\frac{\delta}{2}\right) = \varphi_1\left(L - \frac{\delta}{2}\right) = 0, \quad \theta_2\left(\frac{\delta}{2}\right) = \varphi_2\left(L - \frac{\delta}{2}\right) = H. \end{aligned}$$

Считаем, что θ_2 симметрична θ_1 , а $\varphi_2 - \varphi_1$ относительно прямой $x_2 = \frac{H}{2}$. Таким образом, области $\bar{\tilde{\Omega}}, \tilde{\Omega}$ симметричны относительно той же прямой $x_2 = \frac{H}{2}$. Здесь ε, δ – малые положительные числа, $\varepsilon_1 = \frac{\varepsilon}{2}$.

На рис. 1 изображен канал и обозначены некоторые участки границ.

Для постановки задачи и получения априорных оценок нам потребуется срезающая функция, которую определим так:

$$\zeta(x) = \zeta'(x)\zeta''(x),$$

где $\zeta'(x) = 1$, если $\delta \leq x_1 \leq L - \delta, 0 \leq x_2 \leq H$,

$$0 \leq \zeta'(x) \leq 1,$$

если $\left[\frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq \delta\right] \cup \left[L - \delta \leq x_1 \leq L - \frac{\delta}{2}\right], 0 \leq x_2 \leq H$,

$$\zeta'(x) = 0,$$

если $\left[0 \leq x_1 \leq \frac{\delta}{2}\right] \cup \left[L - \frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L\right], [\theta_1(x_1) \leq x_2 \leq \theta_2(x_1)] \cup [\varphi_1(x_1) \leq x_2 \leq \varphi_2(x_1)]$,

$$\zeta''(x) = 1,$$

если $0 \leq x_1 \leq L, \varepsilon \leq x_2 \leq H - \varepsilon$,

$$0 \leq \zeta''(x) \leq 1,$$

если $[\varepsilon_1 \leq x_2 \leq \varepsilon] \cup [H - \varepsilon \leq x_2 \leq H - \varepsilon_1], 0 \leq x_1 \leq L$,

$$\zeta''(x) = 0,$$

$$[0 \leq x_2 \leq \varepsilon_1] \cup [H - \varepsilon_1 \leq x_2 \leq H], \left[\theta_1^{-1}(x_2) \leq x_1 \leq \varphi_1^{-1}(x_2)\right] \cup \left[\theta_2^{-1}(x_2) \leq x_1 \leq \varphi_2^{-1}(x_2)\right].$$

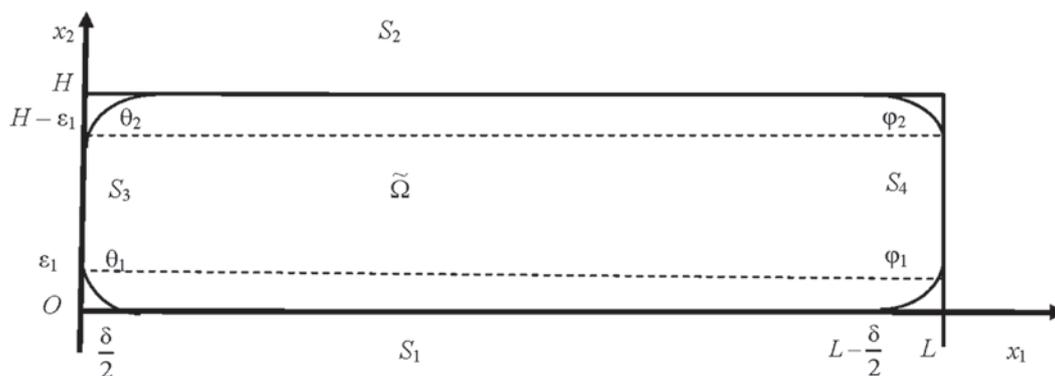


Рис. 1
Fig. 1

Будем предполагать, что $\zeta(x) \in C_{l,\alpha}(\bar{\Omega})$, $\tilde{S} \in C_{l,\alpha}$. Здесь $l \geq 5$, $\alpha \in (0,1)$, а классы функций $C_{l,\alpha}(\bar{\Omega})$, $C_{l,\alpha}(S)$ и смысл принадлежности $S \in C_{l,\alpha}$ определены в [8].

Рассмотрим задачу (плотность $\rho = 1$):

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = \nu \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_k^2} - \sum_{k=1}^2 u_k \frac{\partial u_1}{\partial x_k} - \frac{\partial p}{\partial x_1}, \quad (x,t) \in \tilde{\Omega}_T, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0, \quad (x,t) \in \tilde{\Omega}_T, \quad (2)$$

$$\sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 p}{\partial x_k^2} + \sum_{k=1}^2 \sum_{j=1}^2 \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_k} = 0, \quad (x,t) \in \tilde{\Omega}_T, \quad (3)$$

$$u_1|_{t=0} = \bar{b}(x), \quad \bar{b}|_{S_1 \cup S_2} = 0, \quad x \in \bar{\Omega}, \quad u_1|_{\tilde{S}_T} = \tilde{\psi}_1(s,t), \quad (s,t) \in \tilde{S}_T, \quad (4)$$

$$\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}_T} = \zeta(s) \sum_{j=1}^2 \omega_j(s,t) \cos \alpha_j, \quad (s,t) \in \tilde{S}_T, \quad (5)$$

$$u_2(s,0)|_{S_1 \cup S_2} = 0, \quad (6)$$

$$\int_0^H \frac{\partial \bar{b}(x_1, z)}{\partial x_1} dz = 0, \quad 0 \leq x_1 \leq L, \quad (7)$$

где u_1, u_2 – продольная и поперечная компоненты скорости текущей жидкости соответственно, p – давление жидкости.

При этом для уравнения (2) (при $t > 0$) задача ставится следующим образом (функция u_1 перед этим доопределяется при соответствующем значении времени в четырех криволинейных треугольниках, расположенных по углам $\bar{\Omega}_T$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0, \quad (x,t) \in \Omega_{1T}, \quad u_2|_{S_{1T}} = 0, \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_1}{\partial x_1} = 0, \quad (x,t) \in \Omega_{2T}, \quad u_2|_{S_{2T}} = 0, \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} = 0, \quad (x,t) \in \Omega'_T, \quad \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Big|_{S'_{1T}} = g_1(x_1, \varepsilon_1, t), \quad u_2|_{S'_{2T}} = g_2(x_1, H - \varepsilon_1, t), \end{aligned}$$

где

$$g_1(x_1, \varepsilon_1, t) = - \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Big|_{S'_{1T}}, \quad g_2(x_1, H - \varepsilon_1, t) = - \int_H^{H-\varepsilon_1} \frac{\partial u_1(x_1, z, t)}{\partial x_1} dz.$$

Такая постановка задачи позволяет найти решение уравнения (2), удовлетворяющее условиям прилипания на обеих стенках канала.

В условиях (4) и (5) $\tilde{\psi}_1(s,t) \in C_{l,\alpha}(\tilde{S}_T)$, $\tilde{\psi}_1|_{t=0} = \bar{b}(s)$, $x = s \in \tilde{S}$, $\tilde{\psi}_1 = 0$ при $\frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L - \frac{\delta}{2}$, $[x_2 = 0] \cup [x_2 = H]$, $t \in [0, T]$; $\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}_T}$ – производная по направлению вектора \bar{n} внутренней нормали к \tilde{S}_T ; α_i – угол между вектором \bar{n} и осью Ox_i ; $\omega_i(s,t) = \nu \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} - \sum_{k=1}^2 u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_i}{\partial t}$, $(s,t) \in \tilde{S}_T$, при $t = 0$ $\frac{\partial u_i}{\partial t} = 0$.

В работе [11] предложен численный метод решения задачи (1)–(7), при реализации которого были получены распределения поперечной и продольной компонент скорости течения жидкости, а также распределение давления. Сравнение последнего проводилось по длине канала (результаты представлены на рис. 3, а, б в [11]).

Представим распределения поперечной и продольной компонент скорости, найденные в [11] и позволяющие четко определить понятие стержневого течения жидкости (рис. 2 и 3 соответственно). Обозначения, принятые в данной работе, находятся в следующих соотношениях:

$$x_2 = y + h, \quad u_2 = v, \quad H = 2h, \quad x_1 = x, \quad u_1 = u.$$

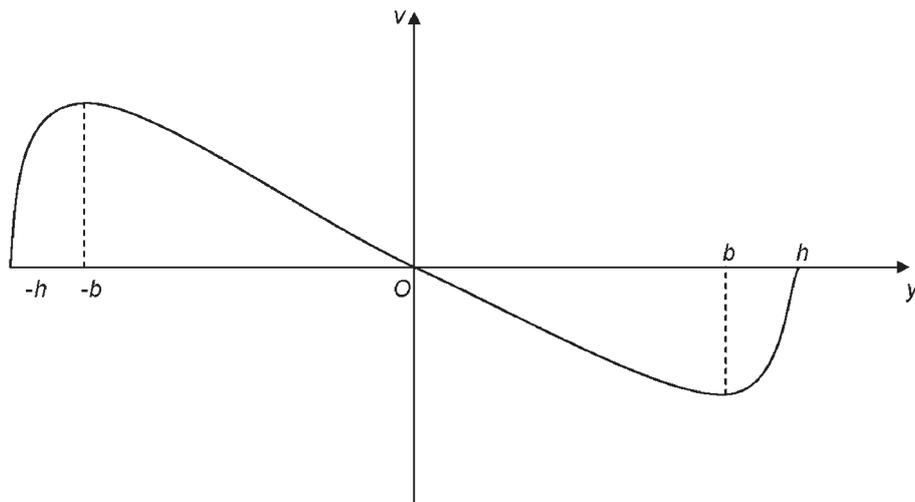


Рис. 2. Распределение поперечной компоненты скорости по ширине канала
 Fig. 2. Distribution of the transverse velocity component over the channel width

На рис. 2 представлено распределение поперечной компоненты скорости u_2 ($u_2 = v$) в направлении координаты x_2 ($x_2 = y$) в сечении канала $x_1 = c$ ($0 < c < L$).

О п р е д е л е н и е 1. Область течения, в которой $\frac{\partial v}{\partial y} < 0$ ($-b < y < b$), называется *стержнем течения* (см. рис. 2).

На рис. 3 показано распределение продольной компоненты скорости u_1 ($u_1 = u$) в направлении координаты $x_2 = y$ в двух сечениях канала $x_1 = c_1$ (кривая 1) и $x_1 = c_2$ (кривая 2), где $0 \leq c_1 < c_2 < L$. Как видим, при движении по каналу в направлении от входа к выходу пограничные слои расширяются, а ядро течения сужается. В масштабе рис. 3 при произвольном значении $x_1 = c$, где $0 < c < L$, точки $y = h$, $y = b$ (а также точки $y = -h$, $y = -b$) почти сливаются. Значит, стержень включает в себя ядро течения и значительные части пограничных слоев, образующихся около стенок канала, т. е. стержень течения занимает почти всю его область, кроме тоненьких оболочек между ним и каждой из стенок.

О п р е д е л е н и е 2. Течение жидкости, которое имеет структуру, представленную на рис. 2, 3, называется *стержневым течением*.

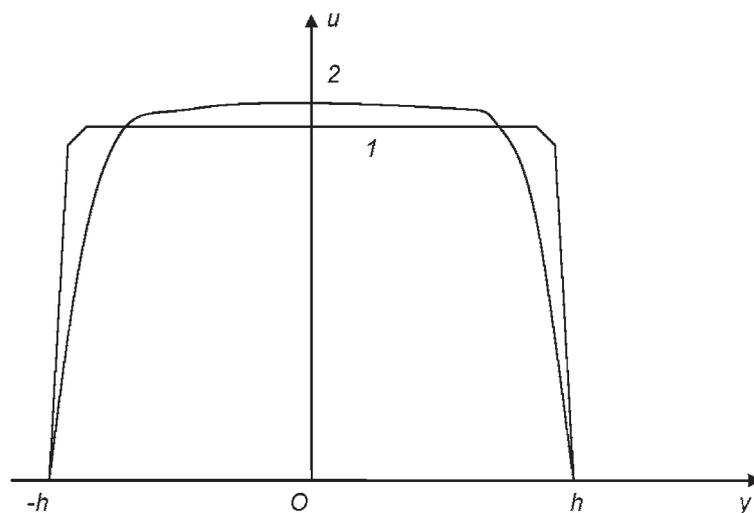


Рис. 3. Распределение продольной скорости по ширине канала:
 кривая 1 – сечение на входе в канал; кривая 2 – сечение на некотором расстоянии от входа в канал

Fig. 3. Distribution of the transverse velocity component over the channel width:
 curve 1 – cross section at the channel inlet; curve 2 – cross section at some distance from the channel inlet

Переходим к задаче (1)–(7). При $t = 0$ функция $u_1(x, 0) = \bar{b}(x)$ задана. Найдем при $t = 0$ функцию u_2 , решая (2) с граничным условием $u_2|_{S_1} = 0$ ($0 \leq x_1 \leq L, 0 < x_2 \leq H$) [1].

Зная функции u_1, u_2 , решаем (3) с условием ($t = 0$)

$$\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}_T} = \zeta(s) \sum_{j=1}^2 \omega_j(s, t) \cos \alpha_j, \quad (s, t) \in \tilde{S}_T,$$

где $\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}_T}$ – производная по направлению вектора \bar{n} внутренней нормали к \tilde{S} , α_i – угол между вектором \bar{n} и осью Ox_i ,

$$\omega_i = v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} - \sum_{k=1}^2 u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k}.$$

Разобьем пространство (x, t) плоскостями $t_m = m\tau$, $m = 0, 1, 2, \dots, M$, на слои и предположим, для сокращения записи, что $M\tau = T$. Пусть $\tilde{\Omega}_m$ есть сечение $\tilde{\Omega}_T$ плоскостью $t_m = m\tau$, \tilde{S}_m – его граница $\tilde{\Omega}_m = \tilde{\Omega}_m \cup \tilde{S}_m$.

На каждом слое $\tilde{\Omega}_m$ определим функции, которые будем обозначать $u_{1,m}, u_{2,m}, p_m, m = \overline{0, M}$. Выше было найдено решение при $t = 0$, т. е. решение $u_{1,0}, u_{2,0}, p_0$. Для нахождения функции u_1 на слоях $\tilde{\Omega}_m$ полагаем:

$$u_1|_{\tilde{S}_T} = \tilde{\psi}_1(s, t), \quad (s, t) \in \tilde{S}_T,$$

где $\tilde{\psi}_1(s, t) \in C_{l,\alpha}(\tilde{S}_T)$, $\tilde{\psi}_1|_{t=0} = \bar{b}(s)$, $x = s \in \tilde{S}$; $\tilde{\psi}_1 = 0$ при $\frac{\delta}{2} \leq x_1 \leq L - \frac{\delta}{2}$, $[x_2 = 0] \cup [x_2 = H]$, $t \in [0, T]$, и преобразуем задачу для u_1 в задачу с нулевым граничным условием. Вводя в рассмотрение функцию $f(x, t)$, удовлетворяющую при любом $t \in [0, T]$ условию $f \in C_{l+1,\alpha}(\tilde{\Omega})$, $f|_{\tilde{S}_T} = \tilde{\psi}_1|_{\tilde{S}_T}$, и новую искомую функцию $w(x, t)$, удовлетворяющую равенству $u_1(x, t) = w(x, t) + f(x, t)$, для $w(x, t)$ получаем задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial w}{\partial t} - v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 w}{\partial x_k^2} + (w + f) \frac{\partial w}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial w}{\partial x_2} + \frac{\partial f}{\partial x_1} w + u_2 \frac{\partial f}{\partial x_2} + F(x, t) + \frac{\partial p}{\partial x_1} &= 0, \\ w|_{\tilde{S}_T} &= 0, \quad w|_{t=0} = \bar{b}(x) - f|_{t=0}, \quad x \in \tilde{\Omega}, \quad \bar{b}(x) - f|_{t=0} = 0, \quad x = s \in \tilde{S}, \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$F(x, t) = \frac{\partial f}{\partial t} - v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x_k^2} + f \frac{\partial f}{\partial x_1}, \quad F \in C_{l-1,\alpha}(\tilde{\Omega}).$$

Вводя обозначения $g_{\bar{t}}(x, t_m) = \frac{1}{\tau} \left(g_m - \overset{\vee}{g}_m \right)$, $g_m = g(x, t_m)$, $\overset{\vee}{g}_m = g(x, t_{m-1})$, полагая $w_m = u_{1,m} - f_m$ и заменяя $\frac{\partial w}{\partial t}$ на разностную производную $w_{\bar{t}}(x, t_m)$, запишем уравнение (8) в виде

$$\begin{aligned} v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 w_m}{\partial x_k^2} - (w_m + f_m) \frac{\partial w_m}{\partial x_1} - \overset{\vee}{u}_{2,m} \frac{\partial w_m}{\partial x_2} - \frac{\partial f_m}{\partial x_1} w_m - \overset{\vee}{u}_{2,m} \frac{\partial f_m}{\partial x_2} - \frac{1}{\tau} w_m + \frac{1}{\tau} \overset{\vee}{w}_m - F_m - \frac{\partial \overset{\vee}{p}_m}{\partial x_1} &= 0, \\ w_m|_{\tilde{S}_m} &= 0, \quad F_m = f_{\bar{t}}(x, t_m) - v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 f_m}{\partial x_k^2} + f_m \frac{\partial f_m}{\partial x_1}. \end{aligned} \quad (9)$$

Будем полагать, что в $\tilde{\Omega}_T$ функция $\frac{\partial f}{\partial x_1}$ полуограничена снизу, т. е.

$$\frac{\partial f}{\partial x_1} \geq \beta_1 = \text{const}. \quad (10)$$

Тогда при выполнении неравенства $\frac{1}{\tau} + \beta_1 > 0$ уравнение (9) с нулевым граничным условием при $m = 1$ имеет единственное решение $w_1 \in C_{l,\alpha}(\bar{\tilde{\Omega}})$. Зная w_1 , из соотношения $u_1 = w + f$ находим $u_{1,1} \in C_{l,\alpha}(\bar{\tilde{\Omega}}_1)$. Продолжим $u_{1,1}$, найденную на $\bar{\tilde{\Omega}}$, на всю область $\bar{\Omega}$, доопределив ее в четырех криволинейных треугольниках, расположенных по углам $\bar{\Omega}$. Рассмотрим, например, треугольник с вершинами $(0,0), (0,\varepsilon_1), \left(\frac{\delta}{2}, 0\right)$. Его криволинейная сторона задается уравнением $x_2 = \theta_1(x_1)$ ($x_1 = \theta_1^{-1}(x_2)$). Полагаем $u_{1,1}(x) = u_{1,1}(x_1, x_2) = u_{1,1}(\theta_1^{-1}(x_2), x_2)$ при $0 \leq x_1 \leq \theta_1^{-1}(x_2)$, $0 \leq x_2 \leq \varepsilon_1$. На остальные криволинейные треугольники продолжение осуществляется аналогично. Функцию $u_{1,1}(x)$ ($t = \tau$), определенную указанным образом на всей $\bar{\Omega}$, обозначаем $u_1(x)$ и решаем уравнение (2) для нахождения $u_2(x)$. Отметим, что условие вида (7) для $u_1(x)$ в общем случае не выполняется и не удастся найти функцию u_2 , удовлетворяющую условию $u_2|_{S_1 \cup S_2} = 0$, решая только уравнение (2).

Поэтому решаем (2) в областях $\Omega_1 = [0 \leq x_1 \leq L, 0 < x_2 \leq \varepsilon]$ и $\Omega_2 = [0 \leq x_1 \leq L, H - \varepsilon \leq x_2 < H]$ с граничными условиями

$$u_2|_{x_2=0} = 0, \quad u_2|_{x_2=H} = 0.$$

Для любого x_2 : $0 < x_2 \leq \varepsilon$ получаем:

$$u_2(x_1, x_2) = - \int_0^{x_2} \frac{\partial u_1(x_1, z)}{\partial x_1} dz, \quad u_2(x_1, H - x_2) = - \int_H^{H-x_2} \frac{\partial u_1(x_1, z)}{\partial x_1} dz.$$

Затем интегрируем уравнение

$$\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} = 0$$

в области $[0 \leq x_1 \leq L, \varepsilon_1 < x_2 < H - \varepsilon_1]$, $\left(\varepsilon_1 = \frac{\varepsilon}{2}\right)$, с граничными условиями

$$\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \Big|_{x_2=\varepsilon_1} = - \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \Big|_{x_2=\varepsilon_1}, \quad u_2|_{x_2=H-\varepsilon_1} = - \int_H^{H-\varepsilon_1} \frac{\partial u_1(x_1, z)}{\partial x_1} dz.$$

Зная функции u_1, u_2 , решаем (3) с условием ($t = \tau$):

$$\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}} = \zeta(s) \sum_{j=1}^2 \omega_j(s) \cos \alpha_j, \quad s \in \tilde{S}, \tag{11}$$

где $\frac{\partial p}{\partial n} \Big|_{\tilde{S}}$ – производная по направлению вектора \bar{n} внутренней нормали к \tilde{S} , α_i – угол между вектором \bar{n} и осью Ox_i , $\omega_i = v \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_k^2} - \sum_{k=1}^2 u_k \frac{\partial u_i}{\partial x_k} - \frac{\partial u_i}{\partial t}$, а $\frac{\partial u_i}{\partial t}$ заменена разностной производной

$$u_{i\bar{t}}(x, t_1) = \frac{1}{\tau} \left(u_{i,1} - u_{i,1}^v \right).$$

Итак, при $t = t_1 = \tau$ получены функции w_1, u_1, u_2, p , т. е. найдены $w_1, u_{1,1}, u_{2,1}, p_1$ на слое $\tilde{\Omega}_1$. Переходим на слой $\tilde{\Omega}_2$ и находим $w_2, u_{1,2}, u_{2,2}, p_2$ и т. д.

Оценка модуля решения w_m . Рассматривая уравнение (9), опуская нижний индекс m и вводя обозначения $\frac{\partial z}{\partial x_i} = z_{x_i}, \frac{\partial^2 z}{\partial x_i^2} = z_{x_i x_i}, w + f = \bar{f}, u_2 f_{x_2} + F + p_{x_1} = d$, получаем

$$w_{\bar{t}} - v \sum_{k=1}^2 w_{x_k x_k} + \bar{f} w_{x_1} + u_2 w_{x_2} + f_{x_1} w + d = 0. \tag{12}$$

В уравнении (12) делаем замену $w = ge^{\beta t}$ ($t = t_m$) и замечаем, что

$$w_t = \frac{1}{\tau} \left(ge^{\beta t} - \overset{\vee}{g} e^{\beta(t-\tau)} \pm ge^{\beta(t-\tau)} \right) = \frac{1}{\tau} e^{\beta(t-\tau)} \left(g - \overset{\vee}{g} \right) + \frac{1}{\tau} ge^{\beta t} (1 - e^{-\beta\tau}).$$

Получаем

$$g_t^- e^{-\beta\tau} - \overset{\vee}{v} \sum_{k=1}^2 g_{x_k x_k} + \bar{f} g_{x_1} + u_2 g_{x_2} + g \left(\frac{1 - e^{-\beta\tau}}{\tau} + f_{x_1} \right) + \frac{d}{e^{\beta t}} = 0. \quad (13)$$

Легко показать, что при $\beta = \text{const} > 0$ $\frac{1 - e^{-\beta\tau}}{\tau} > \beta e^{-\beta\tau}$ и, если $\tau_1 = \text{const} > 0$ такая, что верно неравенство $\frac{1}{\tau_1} + \frac{e^2}{2} \beta_1 > 0$, то существует $\beta > 0$, например $\beta = \frac{2}{\tau_1}$, и при $0 < \tau < \tau_1$ верна цепочка неравенств (см. (10))

$$\beta e^{-\beta\tau} + f_{x_1} \geq \beta e^{-\beta\tau} + \beta_1 > \beta e^{-\beta\tau_1} + \beta_1 > 0. \quad (14)$$

Для функции g , удовлетворяющей уравнению (13), возможны три случая: а) ее максимум в области $\tilde{\Omega}_T$ достигается при $t = 0$, и тогда $g \leq \max \left[\bar{b}(x) - f|_{t=0} \right]$; б) $g \leq 0$; в) положительный максимум достигается в некоторой внутренней точке $(x_0, t_{m_0}) \in \tilde{\Omega}_T$, $m_0 \geq 1$. В этом последнем случае в точке (x_0, t_{m_0}) выполняются условия

$$g_t \geq 0, \quad \forall g_{x_i x_i} \leq 0, \quad i = 1, 2, \quad g_{x_i} = 0, \quad i = 1, 2,$$

и из (13) следует

$$g \left(\frac{1 - e^{-\beta\tau}}{\tau} + f_{x_1} \right) + \frac{d}{e^{\beta t}} \leq 0,$$

а с учетом (14) получаем

$$g \leq \frac{-de^{-\beta t}}{\beta e^{-\beta\tau_1} + \beta_1}.$$

Аналогично устанавливается оценка для g снизу. В результате получаем

$$|w_m| \leq C_1, \quad \text{где } C_1 = e^{\beta T} \left[\max_{x \in \tilde{\Omega}} \left| \bar{b}(x) - f|_{t=0} \right| + \max_{\tilde{\Omega}_T} \left| \frac{de^{-\beta t}}{\beta e^{-\beta\tau_1} + \beta_1} \right| \right]. \quad (15)$$

Оценка первых производных w_m по x_i . Сначала оценим указанные производные на границе \tilde{S}_T , оценивая их на левой, правой, нижней и верхней частях этой границы. Рассмотрим левую часть границы $S'_3 \times [0, T]$,

$$S'_3 = [0 \leq x_2 < \varepsilon_1, x_1 = \theta_1^{-1}(x_2)] \cup [\varepsilon_1 \leq x_2 \leq H - \varepsilon_1, x_1 = 0] \cup [H - \varepsilon_1 < x_2 \leq H, x_1 = \theta_2^{-1}(x_2)],$$

функцию

$$x_1 = \psi(x_2) = \begin{cases} \theta_1^{-1}(x_2), & 0 \leq x_2 < \varepsilon_1 \\ 0, & \varepsilon_1 \leq x_2 \leq H - \varepsilon_1 \\ \theta_2^{-1}(x_2), & H - \varepsilon_1 < x_2 \leq H \end{cases},$$

которая задает S'_3 , и функцию $\chi(x) = \chi(x_1, x_2) = N_1 e^{-N_2(x_1 - \psi(x_2))}$ ($N_1 > 0, N_2 > 0$). Вводя обозначения

$$D_1 = \overset{\vee}{v} \sum_{k=1}^2 \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} - \bar{f} \frac{\partial}{\partial x_1} - u_2 \frac{\partial}{\partial x_2}, \quad D_2 = \left(\int_0^t \frac{\partial}{\partial s} ds \right)_t - D_1,$$

получаем

$$D_1\chi = N_1 \left[vN_2^2 \left(1 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial x_2} \right)^2 \right) + N_2 \left(v \frac{\partial^2\psi}{\partial x_2^2} + \bar{f} - u_2 \frac{\partial\psi}{\partial x_2} \right) \right] e^{-N_2(x_1 - \psi(x_2))}.$$

Наибольшее положительное значение $\chi(x)$ принимает на S'_3 , так как для любой точки $x \in \bar{\tilde{\Omega}}$ $x_1 - \psi(x_2) \geq 0$, а для любой точки $x \in S'_3$ $x_1 - \psi(x_2) = 0$, и при достаточно больших N_1, N_2

$$D_1\chi > \max_{\substack{(x,t) \in \tilde{\Omega}_T \\ |w| \leq C_1}} |f_{x_1} w + d|, \quad \chi|_{S'_3} = N_1 \geq \chi(x) + \left| \bar{b}(x) - f \right|_{t=0} \Big|_{x \in \tilde{\Omega}}. \quad (16)$$

Рассмотрим функцию $w + \chi$ ($w = w_m, m = \overline{0, M}$). Для нее (в силу (12) и (16))

$$D_2(w + \chi) = w_t - D_1 w - D_1 \chi = -f_{x_1} w - d - D_1 \chi < 0$$

в области $\tilde{\Omega}_T$, тогда как в точке максимума функции $w + \chi$ должно быть $D_2(w + \chi) \geq 0$. Далее

$$(w + \chi)|_{S'_3} = N_1 \geq (w + \chi)|_{\tilde{S}}, \quad (w + \chi)|_{t=0} = \chi(x) + \left| \bar{b}(x) - f \right|_{t=0} \Big|_{x \in \tilde{\Omega}} \leq N_1.$$

Отсюда следует, что свое наибольшее значение $w + \chi$ принимает на $S'_{3,T} = S'_3 \times [0, T]$ и $\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{S'_{3,T}} \geq -\frac{\partial \chi}{\partial n} \Big|_{S'_{3,T}}$.

Рассмотрение функции $w - \chi$ позволяет установить неравенство $\frac{\partial w}{\partial n} \Big|_{S'_{3,T}} \leq \frac{\partial \chi}{\partial n} \Big|_{S'_{3,T}}$, а рассмотрение остальных трех частей границы приводит к оценке

$$|w_{x_i}|_{\tilde{S}_T} \leq C_{2s}. \quad (17)$$

Далее могут быть установлены оценки во внутренних точках $\tilde{\Omega}_T$:

$$|w_{x_i}|_{\tilde{\Omega}_T} \leq C_2, \quad |w_{x_i x_j}|_{\tilde{\Omega}_T} \leq C_3, \quad \bar{\tilde{\Omega}}_T \subset \tilde{\Omega}_T, \quad (18)$$

но поскольку устанавливаются они похожими способами, а вторая из оценок (18) доказывается сложнее, то первую из этих оценок будем считать установленной, а второе неравенство из (18) будем доказывать.

Оценка вторых производных w_m по $x_i x_j$. Введем вспомогательные функции $g_i (i = 1, 2)$ следующим образом:

$$w_{x_i} = b(g_i), \quad b(g_i) = -2C_2 + 3aC_2 e \int_0^{g_i} e^{-s} ds, \quad (19)$$

где C_2 – константа из (18), $a > 1$, $h > 1$ – константы, которые определяются ниже. Из (19) следует

$$w_{x_i x_k} = b'(g_i) g_{ix_k} = 3aeC_2 e^{-g_i} g_{ix_k}, \quad w_{x_i x_k x_k} = b'(g_i) g_{ix_k x_k} - b'(g_i) h g_i^{h-1} g_{ix_k}^2.$$

Дифференцируем (12) по x_i ($f_{x_1} = \tilde{f}$, $w_m = w$):

$$w_{ix_i} - v \sum_{k=1}^2 w_{x_k x_k x_i} + \bar{f} w_{x_1 x_i} + u_2 \overset{\vee}{w}_{x_2 x_i} = -\bar{f}_{x_i} w_{x_1} - u_{2x_i} \overset{\vee}{w}_{x_2} - (\tilde{f} w)_{x_i} - d_{x_i},$$

обозначаем правую часть через I_1 , подставляем в последнее уравнение найденные выражения для $w_{x_i x_k}$, $w_{x_i x_k x_k}$, и делим его на $b'(g_i)$:

$$\frac{e^{g_i^h}}{\tau} \left(\frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds \right) - v \sum_{k=1}^2 g_{ix_k x_k} + v h g_i^{h-1} \sum_{k=1}^2 (g_{ix_k})^2 + \bar{f} g_{ix_1} + u_2 \overset{\vee}{g}_{ix_2} = \frac{I_1}{b'(g_i)} \equiv I_2.$$

Полученное равенство дифференцируем по x_j :

$$\frac{1}{\tau} \left(e^{g_i^h} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds \right)_{x_j} - v \sum_{k=1}^2 g_{ix_j x_k x_k} + v h (h-1) g_i^{h-2} g_{ix_j} \sum_{k=1}^2 (g_{ix_k})^2 + 2 v h g_i^{h-1} \sum_{k=1}^2 g_{ix_k} g_{ix_j x_k} + \bar{f} g_{ix_j x_1} + u_2 g_{ix_j x_2} + \bar{f}_{x_j} g_{ix_1} + u_{2x_j} \overset{\vee}{g}_{ix_2} = I_{2x_j} \equiv I_3. \quad (20)$$

Введем в рассмотрение функции $r_{ij} = \zeta g_{ix_j}$. Верны следующие равенства:

$$\zeta g_{ix_j x_k} = r_{ijx_k} - \frac{\zeta_{x_k}}{\zeta} r_{ij}, \quad \zeta g_{ix_j x_k x_k} = r_{ijx_k x_k} - 2 \frac{\zeta_{x_k}}{\zeta} r_{ijx_k} + \left(\frac{2\zeta_{x_k}^2}{\zeta^2} - \frac{\zeta_{x_k x_k}}{\zeta} \right) r_{ij}.$$

Умножая (20) на ζ и используя последние равенства, получаем

$$\begin{aligned} & \frac{\zeta}{\tau} \left(e^{g_i^h} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds \right)_{x_j} - v \sum_{k=1}^2 \left[r_{ijx_k x_k} - 2 \frac{\zeta_{x_k}}{\zeta} r_{ijx_k} + \left(\frac{2\zeta_{x_k}^2}{\zeta^2} - \frac{\zeta_{x_k x_k}}{\zeta} \right) r_{ij} \right] + \right. \\ & + v h (h-1) g_i^{h-2} r_{ij} \sum_{k=1}^2 (g_{ix_k})^2 + 2 v h g_i^{h-1} \sum_{k=1}^2 g_{ix_k} \left(r_{ijx_k} - \frac{\zeta_{x_k}}{\zeta} r_{ij} \right) + \\ & \left. + \bar{f} \left(r_{ijx_1} - \frac{\zeta_{x_1}}{\zeta} r_{ij} \right) + u_2 \left(r_{ijx_2} - \frac{\zeta_{x_2}}{\zeta} r_{ij} \right) + \bar{f}_{x_j} r_{i1} + u_{2x_j} \overset{\vee}{r}_{i2} = \zeta I_3. \quad (21) \right. \end{aligned}$$

Умножаем (21) на $\zeta^2 r_{ij}$ и полученные равенства ($j=1,2$) суммируем по j от 1 до 2 (при этом опустим первое самое громоздкое слагаемое, которое ниже оценим отдельно):

$$\begin{aligned} & -v \zeta^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 \left[r_{ij} r_{ijx_k x_k} - 2 \frac{\zeta_{x_k}}{\zeta} r_{ij} r_{ijx_k} + \left(\frac{2\zeta_{x_k}^2}{\zeta^2} - \frac{\zeta_{x_k x_k}}{\zeta} \right) r_{ij}^2 \right] + v h (h-1) g_i^{h-2} \sum_{j=1}^2 r_{ij}^2 \sum_{k=1}^2 r_{ik}^2 + \\ & + 2 v h g_i^{h-1} \sum_{j=1}^2 r_{ij} \sum_{k=1}^2 r_{ik} (\zeta r_{ijx_k} - \zeta_{x_k} r_{ij}) + \zeta^2 \sum_{j=1}^2 r_{ij} \left(\bar{f}_{x_j} r_{i1} + u_{2x_j} \overset{\vee}{r}_{i2} \right) + \zeta \bar{f} \sum_{j=1}^2 (\zeta r_{ij} r_{ijx_1} - \zeta_{x_1} r_{ij}^2) + \\ & + \zeta u_2 \sum_{j=1}^2 (\zeta r_{ij} r_{ijx_2} - \zeta_{x_2} r_{ij}^2) = \zeta^3 \sum_{j=1}^2 r_{ij} I_3. \quad (22) \end{aligned}$$

Оценим слагаемое, которое было опущено при получении (22):

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{\zeta^4}{\tau} \sum_{j=1}^2 \left[g_{ix_j} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds \right)_{x_j} \right] = \\ &= \frac{\zeta^4}{\tau} \sum_{j=1}^2 \left[g_{ix_j} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds + e^{-g_i^h} g_{ix_j} \right) - e^{-g_i^h} g_{ix_j} \right] = \\ &= \frac{\zeta^4}{\tau} \sum_{j=1}^2 \left[g_{ix_j} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds + g_{ix_j} \right) - e^{g_i^h - g_i^h} g_{ix_j} \right]. \end{aligned}$$

Пусть $J_2 = h g_i^{h-1} \left(m \frac{g_i^{(m)}}{g_i^{(m-1)}} \int e^{-s^h} ds \right)$. Тогда при $g_i(m-1) \leq g_i(m)$ верна цепочка неравенств

$$J_2 \geq h \int_{g_i(m-1)}^{g_i(m)} s^{h-1} e^{g_i^h(m)-s^h} ds = -e^{g_i^h(m)-s^h} \Big|_{g_i(m-1)}^{g_i(m)} = e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} - 1.$$

При $g_i(m-1) \geq g_i(m)$ верна цепочка

$$|J_2| \leq h \int_{g_i(m)}^{g_i(m-1)} s^{h-1} e^{g_i^h(m)-s^h} ds = -e^{g_i^h(m)-s^h} \Big|_{g_i(m)}^{g_i(m-1)} = 1 - e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)},$$

из которой следует $J_2 \geq e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} - 1$. Значит, в обоих случаях $J_2 \geq e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} - 1$. Поэтому

$$\begin{aligned} J_1 &\geq \frac{\zeta^4}{\tau} \sum_{j=1}^2 \left[g_{ix_j}(m) \left(g_{ix_j}(m) \left(e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} - 1 \right) + g_{ix_j}(m) - e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} g_{ix_j}(m-1) \right) \right] = \\ &= \frac{\zeta^4}{\tau} \sum_{j=1}^2 \left[g_{ix_j}(m) e^{g_i^h(m)-g_i^h(m-1)} \left(g_{ix_j}(m) - g_{ix_j}(m-1) \right) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

Теперь вводим функцию $q = \sqrt{\sum_{j=1}^2 r_{ij}^2}$ и рассматриваем (22) в точке (x_0, t_{m_0}) максимума функции $q^2 = \sum_{j=1}^2 r_{ij}^2$, где $m_0 \geq 1$, а x_0 является внутренней точкой $\tilde{\Omega}$ (она находится в области, где $\zeta \neq 0$).

Так как в точке (x_0, t_{m_0})

$$\left(q^2 \right)_{x_k} = 2 \sum_{j=1}^2 r_{ij} r_{ijx_k} = 0, \quad \left(q^2 \right)_{x_k x_k} = 2 \sum_{j=1}^2 r_{ijx_k}^2 + 2 \sum_{j=1}^2 r_{ij} r_{ijx_k x_k} \leq 0,$$

т. е.

$$\sum_{j=1}^2 r_{ijx_k}^2 \leq - \sum_{j=1}^2 r_{ij} r_{ijx_k x_k},$$

и из (23) следует $J_1 \geq 0$, то из (22) получаем

$$\begin{aligned} &v\zeta^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 r_{ijx_k}^2 + v h(h-1) g_i^{h-2} q^4 + 2\zeta v h g_i^{h-1} \sum_{j=1}^2 r_{ij} \sum_{k=1}^2 r_{ik} r_{ijx_k} \leq v \sum_{k=1}^2 \left(2\zeta_{x_k}^2 - \zeta \zeta_{x_k x_k} \right) q^2 + \\ &+ 2v h g_i^{h-1} \sum_{j=1}^2 r_{ij}^2 \sum_{k=1}^2 \zeta_{x_k} r_{ik} + \bar{f} \zeta \zeta_{x_1} q^2 + u_2 \zeta \zeta_{x_2} q^2 - \zeta^2 \sum_{j=1}^2 r_{ij} \left(\bar{f}_{x_j} r_{i1} + u_{2x_j} r_{i2} \right) + \zeta^3 \sum_{j=1}^2 r_{ij} I_3. \end{aligned} \quad (24)$$

Из (19) следует: если $w_{x_i} = -C_2$, то $\int_0^{\gamma_{i1}} e^{-s^h} ds = \frac{1}{3ae}$, если $w_{x_i} = C_2$, то

$$\int_0^{\gamma_{i2}} e^{-s^h} ds = \frac{1}{ae}. \quad (25)$$

Так как при $a > 1, h > 1$ $\frac{1}{ae} < \int_0^{\frac{1}{a}} e^{-s^h} ds < \frac{1}{a}$, то с учетом (25) получаем

$$\frac{1}{3ae} < \gamma_{i1} \leq g_i \leq \gamma_{i2} < \frac{1}{a}. \quad (26)$$

Третье слагаемое в левой части (24) можно оценить так:

$$\left| 2\zeta v h g_i^{h-1} \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 r_{ij} r_{ik} r_{ijx_k} \right| \leq \frac{v}{2} \zeta^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 r_{ijx_k}^2 + 2v h^2 \max_{i=1,2} g_i^{2h-2} q^4. \quad (27)$$

Обозначая правую часть (24) через I_4 и учитывая (27), получаем

$$\frac{1}{2}v\zeta^2 \sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 r_{ijk}^2 + v h q^4 \left[(h-1) \min_{i=1,2} g_i^{h-2} - 2h \max_{i=1,2} g_i^{2h-2} \right] \leq I_4. \quad (28)$$

Выберем $a > 3e$, например, полагаем $a = 4e$. В силу (26)

$$v h^2 q^4 \left[\frac{h-1}{h} \min_{i=1,2} g_i^{h-2} - 2 \max_{i=1,2} g_i^{2h-2} \right] > v h^2 q^4 \left(\frac{1}{12e^2} \right)^{h-2} \left[\frac{h-1}{h} - 2 \left(\frac{1}{4e} \right)^2 \left(\frac{3}{4} \right)^{h-2} \right].$$

Выберем $h = h_0$ настолько большим, чтобы $\left[\frac{h_0-1}{h_0} - 2 \left(\frac{1}{4e} \right)^2 \left(\frac{3}{4} \right)^{h_0-2} \right] > \frac{1}{a}$. Из (28) получаем

$$\frac{1}{a} v h^2 q^4 \left(\frac{1}{12e^2} \right)^{h_0-2} \leq I_4. \quad (29)$$

Из (29) после несложных оценок слагаемых из I_4 следует оценка

$$\left| w_{x_i x_j} \right|_{\tilde{\Omega}'_T} \leq C_3. \quad (30)$$

Заметим, что

$$q^4 = \left(\sum_{j=1}^2 r_{ij}^2 \right)^2 = \zeta^4 \left(\sum_{j=1}^2 g_{ixj}^2 \right)^2 = \zeta^4 \left[\sum_{j=1}^2 \left(\frac{e^{g_i^h}}{3aC_2e} w_{x_i x_j} \right)^2 \right]^2. \quad (31)$$

Поэтому константа C_3 такова, что $C_3 < \infty$ для любой строго внутренней подобласти $\tilde{\Omega}'$ области $\tilde{\Omega}$, но при приближении границы $\tilde{\Omega}'$ к границе $\tilde{\Omega}$ безгранично растет.

После вычисления (30) аналогичным способом могут быть получены оценки

$$\left| w_{x_i x_j x_k} \right|_{\tilde{\Omega}''_T} \leq C_4, \quad \left| w_{x_i x_j x_k x_s} \right|_{\tilde{\Omega}'''_T} \leq C_5, \quad \tilde{\Omega}''_T \subset \tilde{\Omega}'_T, \quad \tilde{\Omega}'''_T \subset \tilde{\Omega}''_T$$

и затем выполнен предельный переход при $\tau \rightarrow 0$, доказывающий разрешимость задачи (1)–(7) [10]. При указанных выше требованиях, накладываемых на данные, решение является классическим.

Заключение. Отметим, что для первой производной функции w удается получить ее оценку (17) на границе области, а для производных более высокого порядка их не существует. Поэтому оценки для производных второго и более высоких порядков удается получить только в строго внутренних подобластях рассматриваемой области решения.

Список использованных источников

1. Каянович, С. С. Разрешимость дифференциальной модели стержневого течения / С. С. Каянович // Вес. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2015. – № 1. – С. 52–59.
2. Schauder, J. Über lineare elliptische Differentialgleichungen zweiter Ordnung / J. Schauder // Math. Zeitschr. – 1934. – Vol. 38, N 2. – P. 257–283.
3. Бернштейн, С. Н. Ограничение модулей последовательных производных решений уравнений параболического типа / С. Н. Берштейн // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 1938. – Т. 18, № 3. – С. 385–389.
4. Ладыженская, О. А. Смешанная задача для гиперболического уравнения / О. А. Ладыженская. – М., 1953.
5. Ладыженская, О. А. О разрешимости основных краевых задач для уравнений параболического и гиперболического типов / О. А. Ладыженская // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 1954. – Т. 97, № 3. – С. 395–398.
6. Ладыженская, О. А. Первая краевая задача для квазилинейных параболических уравнений / О. А. Ладыженская // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 1956. – Т. 107, № 5. – С. 636–639.
7. Ладыженская, О. А. Решение первой краевой задачи в целом для квазилинейных параболических уравнений / О. А. Ладыженская // Тр. Моск. мат. о-ва. – 1958. – Т. 7. – С. 149–177.
8. Ладыженская, О. А. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа / О. А. Ладыженская, Н. Н. Уральцева. – М.: Наука, 1964. – 538 с.

9. Ладыженская, О. А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О. А. Ладыженская, В. А. Солонников, Н. Н. Уралцева. – М.: Наука, 1967. – 736 с.
10. Соболев, С. Л. Некоторые применения функционального анализа в математической физике / С. Л. Соболев. – Л.: ЛГУ, 1950. – 256 с.
11. Каянович, С. С. Стержневое течение вязкой жидкости / С. С. Каянович // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-тэхн. навук. – 2013. – № 3. – С. 32–35.

References

1. Kayanovich S.S. Solvability of the differential model of plug flow. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2015, no. 1, pp. 52–59. (in Russian)
2. Schauder J. Uber lineare elliptische Differentialgleichungen zweiter Ordnung. *Mathematische Zeitschrift*, 1934, vol. 38, no. 1, pp. 257–282. doi: 10.1007/BF01170635. (in German)
3. Bernshtein S.N. Restriction of the modules of the successive derivatives of the solutions of the parabolic-type equations. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 1938, vol. 18, no. 3, pp. 385–389. (in Russian)
4. Ladyzhenskaya O.A. *Mixed problem for the hyperbolic equation*. Moscow, State Publishing House technical and theoretical literature, 1953. 280 p. (in Russian)
5. Ladyzhenskaya O.A. Solvability of the basic boundary-value problems for the parabolic- and hyperbolic-type equations. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 1954, vol. 97, no. 3, pp. 395–398. (in Russian)
6. Ladyzhenskaya O.A. First boundary-value problem for quasi-linear parabolic equations. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi* [Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus], 1956, vol. 107, no. 5, pp. 636–639. (in Russian)
7. Ladyzhenskaya O.A. Solution of the first boundary-value problems, in general for quasi-linear parabolic equations. *Trudy Moskovskogo matematicheskogo obshchestva* [Works of the Moscow Mathematical Society], 1958, vol. 7, pp. 149–177. (in Russian)
8. Ladyzhenskaya O.A., Ural'tseva N.N. *Linear and quasi-linear equations of elliptical type*. Moscow, Nauka, 1964. 538 p. (in Russian)
9. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. *Linear and quasi-linear equations of parabolic type*. Moscow, Nauka, 1967. 736 p. (in Russian)
10. Sobolev S.L. *Some applications of the functional analysis in mathematical physics* Leningrad, Leningrad State University, 1950. 256 p. (in Russian)
11. Kayanovich S.S. Plug flow of viscous fluid. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Ser. Fizika-tekhnichnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physico-Technical series], 2013, no. 3, pp. 32–35. (in Russian)

Сведения об авторе

Каянович Сергей Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей математики, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровка, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: sergkay@mail.ru

Для цитирования

Каянович, С. С. Краевая задача для стержневого течения в канале / С. С. Каянович // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 55–66.

Information about the author

Kayanovich Siarhei Siarheevich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Assistant Professor of the Chair of Higher Mathematics, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: sergkay@mail.ru

For citation

Kayanovich S.S. Boundary-value problem for plug flow in the channel. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 55–66. (in Russian)

ФИЗИКА
PHYSICS

УДК 544.022,546.03,546.04

Поступила в редакцию 23.09.2016

Received 23.09.2016

**А. В. Станчик¹, С. М. Барайшук², С. А. Башкиров¹, В. Ф. Гременок¹,
М. С. Тиванов³, М. Б. Дергачева⁴, К. А. Уразов^{4,5}**

¹Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению, Минск, Беларусь²Белорусский государственный аграрный технический университет, Минск, Беларусь³Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь⁴Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского, Алматы, Казахстан⁵Казахстанско-Британский технический университет, Алматы, Казахстан

**ИССЛЕДОВАНИЕ ТОНКИХ ПЛЕНОК $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$
МЕТОДОМ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ**

Методом атомно-силовой микроскопии исследовано влияние типа подложки на структуру и шероховатость поверхности пленок $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$, полученных методом селенизации металлических прекурсоров Cu-Zn-Sn на подложках из стекла с подслоем молибдена и молибденовой фольги (Mo/стекло, Mo-фольга). Обнаружено, что пленки $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ на подложках Mo/стекло и Mo-фольга имеют близкие значения шероховатости и зернистую структуру. Пленки $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ имеют более высокие значения шероховатости и максимальной высоты неровности профиля, чем металлические прекурсоры Cu-Zn-Sn. Увеличение шероховатости при формировании пленок $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ из прекурсоров происходит за счет роста зерен в процессе отжига и селенизации.

Ключевые слова: $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$, тонкие пленки, прекурсоры, электрохимическое осаждение, гибкие подложки, атомно-силовая микроскопия.

A. V. Stanchik¹, S. M. Barajshuk², S. A. Bashkirov¹, V. F. Gremenok¹, M. S. Tivanov³, M. B. Dergacheva⁴, K. A. Urazov^{4,5}

¹Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus²Belarusian State Agrarian Technical University, Minsk, Belarus³Belarusian State University, Minsk, Belarus⁴Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry, Almaty, Kazakhstan⁵Kazakh-British Technical University, Almaty, Kazakhstan

INVESTIGATION OF $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ THIN FILMS BY ATOMIC FORCE MICROSCOPY

In comparison to the traditional use of glass substrates, the thin films onto metal substrates offer improved device coloring, economical large-scale roll-to-roll processing, and applicability in lightweight, as well as flexible products. However, unlike glass, metal foils tend to exhibit rough surfaces. This article studies the substrate-type (Mo/glass and Mo-foil) effect on the topographic characteristics of the $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ films by atomic force microscopy (AFM). $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films were prepared by the electrodeposition of stack copper/tin/copper/zinc (Cu/Sn/Cu/Zn) precursors, followed by selenization. AFM was used to study the topographic characteristics of thin films, including grain size, surface roughness, and maximum height of the profile. It is shown that the films obtained on Mo/glass and Mo-foil substrates have similar roughness and in the both cases the grain structure is formed. The $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films show relatively high surface roughness and maximum roughness profile height compared to Cu-Zn-Sn precursors. The increase in the surface roughness of the films was caused by the growth of grains during annealing and selenization processes.

Keywords: $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$, thin films, precursors, electrochemical deposition, flexible substrate, atomic force microscopy.

Введение. Традиционно в фотоактивных слоях тонкопленочных фотопреобразователей (ТФП) используются такие многокомпонентные полупроводники, как $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ и CdTe [1]. Однако в связи с токсичностью кадмия и высокой стоимостью индия и галлия возникает необходимость в поиске альтернативных материалов на основе нетоксичных и доступных компонентов [2, 3]. К числу перспективных материалов для ТФП относится $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ (CZTSe) [4]. Полупроводниковый материал CZTSe характеризуется оптической шириной запрещенной зоны $\sim 1,0$ эВ, высоким значением показателя поглощения ($> 10^4$ см⁻¹) и *p*-типом проводимости [4]. Кроме того,

он состоит из широко распространенных в природе, доступных и малотоксичных компонентов, что делает ТФП на его основе дешевыми и экологически чистыми.

В настоящее время в большинстве работ по получению тонкопленочных фотопреобразователей используются стеклянные подложки [5–9], однако это ограничивает применение ТФП в областях, где существуют такие требования, как малый вес, гибкость и т. д. [10]. Гибкие металлические фольги позволяют расширить спектр областей применения ТФП [11, 12], они способствуют лучшему отводу тепла от приборов [13], а также являются легкими, прочными и тонкими [14, 15]. Подложки из фольги позволяют использовать промышленную рулонную технологию производства пленок, обеспечивающую непрерывный процесс их осаждения на высоких скоростях с использованием компактного и недорогого оборудования. Кроме того, применение гибких металлических подложек исключает необходимость осаждения проводящего тыльного слоя. В результате стоимость изготовления модулей тонкопленочных фотопреобразователей может быть существенно снижена. Однако необходимо отметить, что эффективность ТФП на гибких металлических подложках на несколько процентов ниже, чем на стеклянных [15, 16], что обусловлено диффузией примесей из металлических подложек [15, 17, 18] и их шероховатостью [19].

Известны следующие механизмы влияния шероховатости подложки на эффективность тонкопленочных фотопреобразователей [15]:

1) зародышеобразование – шероховатая подложка обеспечивает рост пленки с большим количеством центров зародышей, что становится причиной образования более мелких зерен и появления большого числа дефектов;

2) диффузия примесей – ее усиление на высокотемпературной стадии синтеза пленки может происходить на шероховатой подложке из-за увеличенной поверхности раздела между подложкой (тыльным контактом) и пленкой;

3) шунтирующее действие – множество структурных образований на поверхности подложки может приводить к шунтированию.

Таким образом, изучение шероховатости поверхности подложек и пленок позволяет осуществлять правильный выбор морфологии интерфейсов с целью повышения эффективности тонкопленочных фотопреобразователей. Как показали исследования [20–23], поверхность пленок и морфология интерфейсов, характеризующиеся шероховатостью, играют важную роль в увеличении поглощения падающего света путем уменьшения потерь на отражение. Существенное повышение эффективности преобразования за счет особой шероховатости интерфейсов было получено в работах [24–27].

В изучении топологии пленок широкие возможности открывает применение метода атомно-силовой микроскопии (АСМ) [28]. В настоящей работе представлены результаты исследования методом АСМ влияния типа подложек (Мо/стекло и Мо-фольга) на структуру и шероховатость поверхности пленок CZTSe.

Методика эксперимента. Тонкие пленки CZTSe получены путем селенизации прекурсоров Cu-Zn-Sn. Металлические прекурсоры Cu-Zn-Sn были послойно электрохимически осаждены на подложки Мо/стекло и Мо-фольга в следующем порядке: подложка/Cu/Sn/Cu/Zn. В качестве анодов для осаждения соответствующих металлических слоев использовались пластины из промышленной анодной меди, высокочистого олова (99,999 %) и цинка. Растворы электролитов были приготовлены из деионизированной воды с добавлением CuSO_4 , ZnSO_4 , SnSO_4 и цитрата натрия. Перед осаждением прекурсоров Cu-Zn-Sn подложка из Мо-фольги подвергалась механической обработке для удаления оксидного слоя. Поверхность подложек Мо/стекло и Мо-фольги промывалась в спирте и дистиллированной воде, после чего просушивалась горячим воздухом. Предварительный отжиг осажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn проводился в атмосфере 95 % $\text{Ar} + 5\% \text{H}_2$ при температуре 350 °С в течение 30 мин, после чего прекурсоры охлаждались при комнатной температуре. Предварительный отжиг прекурсоров Cu-Zn-Sn требуется для формирования бинарных интерметаллических фаз (Cu_xSn_y и Cu_xZn_y), которые при селенизации образуют с селеном тройные соединения (Cu_2SnSe_3 и др.) и затем, реагируя с ZnSe, образуется соединение CZTSe [29]. В случае селенизации Cu-Zn-Sn прекурсоров без предварительного отжига происходит образование нежелательных фаз бинарных селенидов, ухудшающих эффективность ТФП.

Селенизацию отожженных прекурсоров Cu-Zn-Sn проводили в кварцевом контейнере (объем 12,5 см³) с 5 мг порошкообразного Se при давлении газа Ar в 1 бар и температуре 400–500 °С.

Исследования структуры и шероховатости поверхности подложек (Мо/стекло и Мо-фольга), прекурсоров Cu-Zn-Sn и пленок CZTSe осуществлялись с использованием атомно-силового микроскопа NT 206 («Microtestmachines Co.», Беларусь) в контактном режиме. Для изучения поверхности образцов на каждом из них было выбрано не менее 5 площадок с областью сканирования размером 10×10 мкм². По каждой области получали значения средней арифметической и средней квадратичной шероховатости, максимальной высоты неровности профиля поверхности, после чего результаты усреднялись для каждого образца.

Результаты и обсуждение. На рисунке представлены характерные АСМ-изображения поверхности подложек Мо/стекло и Мо-фольга, осажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn и пленок CZTSe, полученных на соответствующих подложках. В таблице даны усредненные значения следующих параметров: максимальной высоты неровности профиля (R_t), средней арифметической (R_a) и средней квадратичной (R_q) шероховатости поверхности исследуемых образцов, рассчитанные из данных АСМ с использованием программного обеспечения SurfaceExplorer с помощью стандартных формул [30, 31].

Максимальная высота неровности профиля (R_t или R_{\max}). Данный параметр очень чувствителен к высоким пикам и глубоким впадинам, поэтому R_t определяется как максимальный перепад высот между самой верхней и нижней точками поверхности профиля:

$$R_t = R_p + R_v, \quad (1)$$

где R_p – максимальная высота пиков, определяется как максимальная высота выше средней линии, R_v – максимальная глубина впадин, определяется как максимальная глубина профиля ниже средней линии в пределах длины оценки профиля.

Средняя линия – линия, которая делит профиль так, чтобы сумма квадратов отклонений высоты профиля от нее была равна нулю.

Средняя арифметическая шероховатость (R_a) – характеризует среднее арифметическое отклонение значений пиков и впадин на профиле от средней линии. Определяется следующим образом:

$$R_a = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N |z_n|, \quad (2)$$

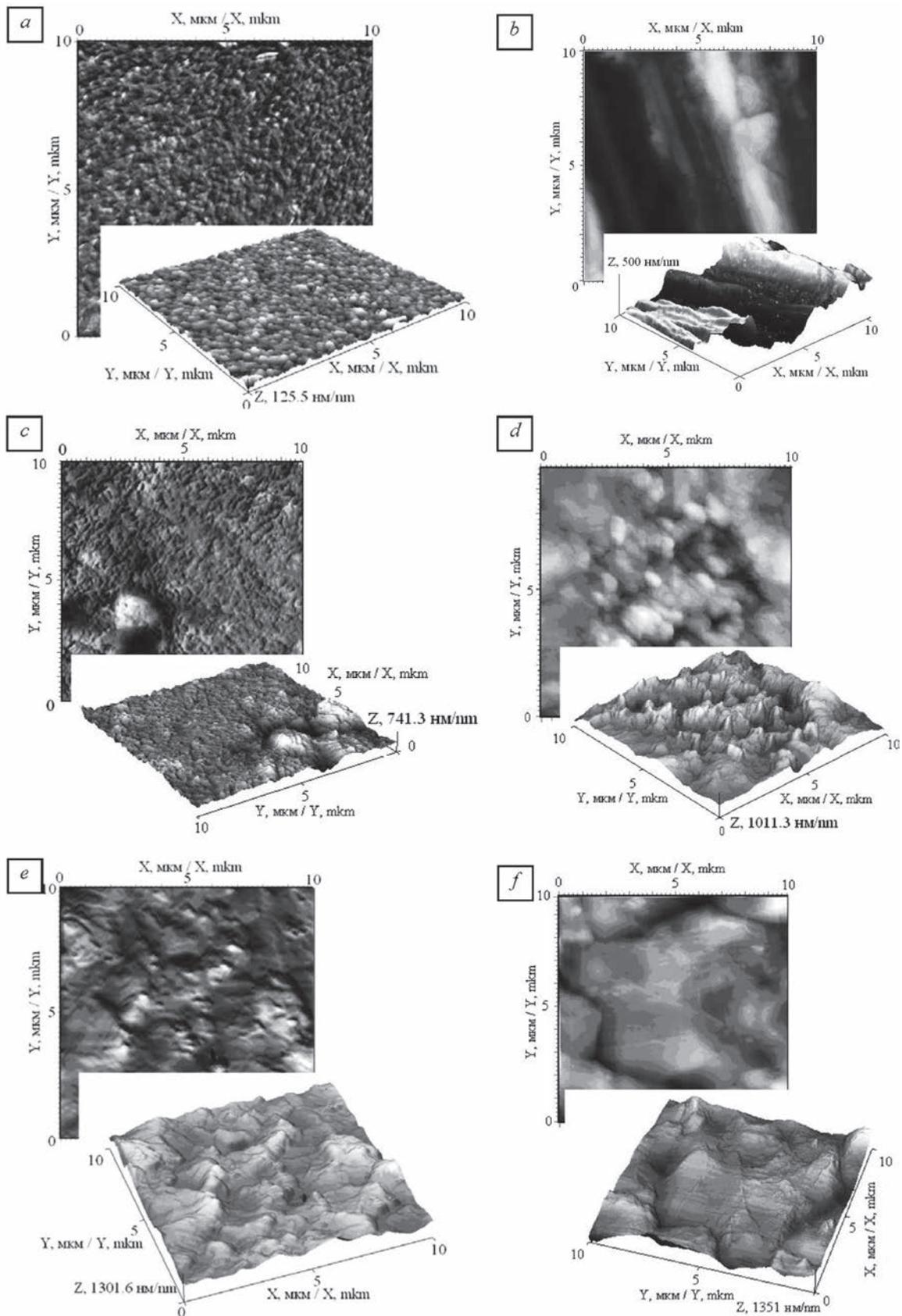
где N – общее количество точек сканирования в анализируемой области, z_n – высота n -й точки в z -направлении.

Средняя квадратичная шероховатость (R_q) – представляет собой стандартное отклонение распределения высот на поверхности и является важным параметром для описания шероховатости поверхности с помощью статистических методов. Определяется следующим образом:

$$R_q = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N z_n^2}. \quad (3)$$

Показатели шероховатости и максимальной высоты неровности профиля исследуемых образцов
Roughness and maximum height of the profile parameters of the studied samples

Параметр Parameter	Подложка Substrates		Cu-Zn-Sn		CZTSe	
	Мо/стекло Mo/glass	Мо-фольга Mo-foil	Мо/стекло Mo/glass	Мо-фольга Mo-foil	Мо/стекло Mo/glass	Мо-фольга Mo-foil
R_t , нм R_t , nm	156,9	559,9	844,3	1084,1	2017,7	2679,6
R_a , нм R_a , nm	8,2	144,2	68,3	116,6	185,6	204,5
R_q , нм R_q , nm	9,9	178,4	96,6	148,9	231,8	268,1



АСМ-ізабражэнні паверхні: падложкі Мо/стэкла (а) і Мо-фольга (б); прэкурсораў Cu-Zn-Sn на падложках Мо/стэкла (с) і Мо-фольга (д); плёнок CZTSe на падложках Мо/стэкла (е) і Мо-фольга (ф)

AFM images of the surface of: the substrate of Mo/glass (a) and Mo-foil (b); Cu-Zn-Sn precursors on Mo/glass substrate (c), and Mo-foil (d); CZTSe films on Mo/glass substrate (e) and the Mo-foil (f)

АСМ-изображения на рисунке, *a*, *b* хорошо демонстрируют различия двух типов подложек. Поверхность подложки Мо/стекло представляет собой мелкозернистую структуру с четко различимыми границами между зернами, латеральный размер которых достигает $\sim 300 \times 300$ нм², высота – 15–20 нм. Также наблюдаются единичные вкрапления с высотой порядка 200 нм. Плотность зерен на представленной площади 10×10 мкм² (см. рисунок, *a*) составляет ~ 50 мкм⁻². Поверхность подложки из Мо-фольги, напротив, имеет более развитый рельеф поверхности и резкие перепады по высоте. На поверхности Мо-фольги можно выделить наличие неоднородностей в виде борозд (темные полосы), а также образования размерами 1–5 мкм высотой до 0,5 мкм. Неоднородности, в виде борозд, являются царапинами, которые появились в процессе механической обработки подложки перед электроосаждением прекурсоров Cu-Zn-Sn.

Как следует из результатов, представленных в таблице, подложка из Мо-фольги ввиду механической обработки имеет более высокие значения шероховатости и значительный перепад высот рельефа по сравнению со стеклянной подложкой с подслоем Мо.

Анализ топологии осажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn показывает, что для образцов на подложках Мо/стекло и Мо-фольга (рисунок, *c*, *d*) формируется различный микрорельеф поверхности [32]. На поверхности прекурсора Cu-Zn-Sn, осажденного на подложку Мо/стекло, наблюдается локальная зернистая структура, а также присутствуют эрозийные участки, которые в процессе осаждения образуют кластеры с латеральными размерами $1,2 \times 1,5$ мкм² и высотой 150–200 нм. Зерна имеют округлую форму с размерами порядка 300×300 нм² при высоте 15–20 нм. Плотность локальных областей на представленной области (см. рисунок, *c*) составляет $\sim 0,3$ мкм⁻². Также на поверхности прекурсора Cu-Zn-Sn наблюдаются нанометровые поры, появление которых может быть обусловлено выделением водорода в процессе восстановления металла из электролита. На поверхности осажденных на Мо-фольгу прекурсоров Cu-Zn-Sn происходит формирование зернистой структуры (см. рисунок, *d*). Зерна имеют приблизительно одинаковую форму (продолговатые, ориентированные в одном направлении вдоль нормали к подложке) и их средний размер достигает 600×1000 нм² с высотой 500 нм. Плотность зерен на представленной площадке (см. рисунок, *d*) составляет порядка 3 мкм⁻².

Шероховатость поверхности прекурсоров Cu-Zn-Sn на подложке Мо/стекло (см. таблицу) существенно (в 8–9 раз) выше значений шероховатости самой подложки. В то же время для прекурсоров Cu-Zn-Sn на подложке из Мо-фольги характерна обратная тенденция: уменьшение шероховатости поверхности прекурсоров по сравнению с шероховатостью подложки на 16–20 %. Значения шероховатости прекурсоров Cu-Zn-Sn на Мо-фольге несколько выше, чем на подложке Мо/стекло, что подтверждает влияние поверхности подложки из Мо-фольги на формирование топологии прекурсоров и согласуется с ранее известными результатами [33].

Из АСМ-изображений поверхности пленок CZTSe на подложках Мо/стекло и Мо-фольга (рисунок, *e*, *f*) следует, что в обоих случаях сформирована зернистая структура. Можно выделить зерна двух типов: крупные и мелкие. Для пленок CZTSe на подложке Мо/стекло характерны следующие размеры крупных и мелких зерен: 400×200 и 270×130 нм² высотой 160–194 нм, а для пленки на Мо-фольге: $6 \times 7,2$ и $1 \times 1,1$ мкм² приблизительно одинаковой высоты ~ 280 нм. В первом случае плотность для крупных зерен составляет $6,5$ мкм⁻², для мелких – 12 мкм⁻², во втором случае плотность распределения мелких зерен – $0,07$ мкм⁻².

Из рисунка, *c–f* видно, что на поверхности пленок CZTSe на исследуемых подложках (Мо/стекло и Мо-фольга) наблюдается изменение структуры по отношению к прекурсорам Cu-Zn-Sn, обусловленное развитием во время предварительного отжига и селенизации двух конкурирующих процессов: роста зерен и агломерации материала. Также наблюдается увеличение значений максимальной высоты неровности профиля и шероховатости пленок CZTSe в обоих случаях по сравнению с прекурсорами Cu-Zn-Sn (см. таблицу), которое связано с увеличением размеров зерен.

Значения параметров шероховатости для пленок CZTSe, осажденных на подложки Мо/стекло и Мо-фольга (см. таблицу), имеют неожиданно малое расхождение, если учесть, что подложка из Мо-фольги изначально имела существенно более высокие значения шероховатости и дефекты в виде царапин по сравнению с подложкой из стекла с подслоем молибдена. Данный факт свидетельствует о том, что шероховатость металлических подложек оказывает незначительное влияние

на микро- и нанорельеф полупроводниковых пленок аналогично тому, как это наблюдалось для других материалов [33, 34]. Таким образом, топологические свойства Mo-фольги не препятствуют ее потенциальному использованию в качестве материала подложки для тонкопленочных фотопреобразователей.

Заключение. Исследование топологии прекурсоров Cu-Zn-Sn и пленок CZTSe методом атомно-силовой микроскопии позволило получить сведения о зависимости структуры и шероховатости поверхности от типа подложки (Mo/стекло, Mo-фольга). Показано, что на топологические свойства прекурсоров Cu-Zn-Sn, полученных электрохимическим осаждением, оказывает влияние тип подложки. Предварительный отжиг и селенизация осажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn приводит к увеличению средней шероховатости и максимальной высоты неровности профиля поверхности. В обоих случаях образуется зернистая структура на поверхности пленок CZTSe. Увеличение шероховатости пленок CZTSe связано с ростом зерен в процессе термической обработки (предварительный отжиг, селенизация). Пленки CZTSe на исследуемых подложках имеют близкие значения шероховатостей, что говорит о возможности использования гибкой металлической фольги в качестве подложки для пленок.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф15КОР-004), Министерства образования и науки Республики Казахстан (грант № 0200/ГФ4) и Государственной программы научных исследований «Физическое материаловедение, новые материалы и технологии» (МТМ 1.0.6).

Acknowledgements

This work was supported by Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant no. F15KOR-004), Ministry of Education and Science, Kazakhstan (grant no. 0200/GF4) and State Programme for Research «Physical material science, new materials and technologies» (MTM 1.0.6).

Список использованных источников

1. Solar cell efficiency tables (version 48) / M. A. Green [et al.] // Prog. Photovolt: Res. Appl. – 2016. – Vol. 24. – P. 905–913.
2. Green, M. A. Estimates of Te and In prices from direct mining of known ores / M. A. Green // Prog. Photovolt: Res. Appl. – 2006. – Vol. 14. – P. 347–359.
3. Fthenakis, V. M. Toxic Materials Released from Photovoltaic Modules During Fires: Health Risks / V. M. Fthenakis, P. D. Moskowitz // Prog. Photovolt: Res. Appl. – 1995. – Vol. 29, N 1. – P. 63–71.
4. Paranthaman, M. P. Semiconductor Materials for Solar Photovoltaic Cells / M. P. Paranthaman, W. Wong-Ng, R. N. Bhattacharya. – Switzerland: Springer International Publishing, 2016. – P. 25.
5. Formation of structure of the CdTe film, recrystallized on Mo/glass substrate under high temperature and mechanical pressure / V. Mikli [et al.] // Thin Solid Films. – 2009. – Vol. 517, N 7. – P. 2252–2255.
6. Toshiyuki, Y. Characterization of Cu(In,Ga)Se₂ thin films prepared by thermal crystallization on Mo/glass substrate / Y. Toshiyuki, Y. Yukio, Y. Akira // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2001. – Vol. 67, N 1/4. – P. 77–82.
7. Characterization of thin-film a-Si:H/μc-Si:H tandem solar cells on glass substrates / A. Klossek [et al.] // Crystal Research and Technology. – 2013. – Vol. 48, N 5. – P. 279–286.
8. Synthesis of wurtzite Cu₂ZnSnS₄ thin films directly on glass substrates by the solvothermal method / H. Guan [et al.] // Materials Letters. – 2015. – Vol. 159. – P. 200–203.
9. Schock, H.-W. Properties of Chalcopyrite-Based Materials and Film Deposition for Thin Film Solar Cells / H.-W. Schock. – Berlin: Springer Series in Photovoltaics, 2004. – 259 p.
10. Pagliaro, M. Flexible Solar Cells / M. Pagliaro, G. Palmisano, R. Ciriminna. – Italy: WILEY-VCH, 2008. – P. 190.
11. Structural Design of Flexible Solar Generators / K. Seifart [et al.] // Proc. of the 7th ESPC, Stresa, Italy, May 9–13 2005 / European Space Agency (ESA); ed. by A. Wilson. – Stresa, Italy, 2005. – P. 200–210.
12. Flexible Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells for space application / K. Ottea [et al.] // Thin Solid Films. – 2006. – Vol. 511/512. – P. 613–622.
13. Петрусёв, А. С. Повышение эффективности солнечных батарей с помощью одноосного трекера и акрилового концентратора / А. С. Петрусёв // Современные техника и технологии: материалы XX Междунар. науч.-практ. конф., Томск., 14–18 апр. 2014 г. / Нац. исслед. Томский политехн. ун-т. – Томск, 2014. – С. 37–38.
14. A 21.5% efficient Cu(In,Ga)Se₂ thin-film concentrator solar cell / J. S. Ward [et al.] // Prog. Photovolt: Res. Appl. – 2002. – Vol. 10. – P. 41–45.

15. Impact of substrate roughness on $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{1-x}\text{Se}_2$ device properties // W. K. Batchelor [et al.] // *Solar Energy Materials and Solar Cells*. – 2004. – Vol. 83, N 1. – P. 67–80.
16. CIGS solar cells on flexible stainless steel substrates / T. Satoh [et al.] // *Proc. of the 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference, Anaheim, CA, 2000* / Electron Devices Society of the Institute of Electrical and Electronics Engineers; Edited by Simon Liu [et al.]. – Anaheim, CA, 2000. – P. 567–570.
17. Flexible and Light Weight Substrates for $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ Solar Cells and Modules / M. Hartman [et al.] // *Proc. of the 28th IEEE Photovoltaics Specialists Conference, Anaheim, CA, 2000* / eds: Simon Liu [et al.]. – Anaheim, CA, 2000. – P. 638–642.
18. The Application of Metallic Foils as Substrate for CIGS Thin Film Solar Cells / G. San Vicente [et al.] // *Proc. of the 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference, London, UK, 2001* / James & James Science Publishers Ltd.; Edited by P. Fath [et al.]. – London, UK, 2001. – P. 638–642.
19. Batchelor, W. K. Substrate and Back Contact Effects in CIGS Devices on Steel Foil / W.K. Batchelor // *Proc. of the 29th IEEE Photovoltaics Specialist's Conference, New Orleans, LA, 0-24 May 2002* / eds: Daniel Feuermann [et al.]. – New Orleans, LA, 2002. – P. 719.
20. Dependence of Film Surface Roughness on Surface Migration and Lattice Size in Thin Film Deposition / J. Huang [et al.] // *American Control Conference, San Francisco, CA, USA June 29 – July 01, 2011*. / Agilent Technologies; eds: Martha Grover [et al.]. – USA, 2011. – P. 2957–2962.
21. Poruba, A. Optical absorption and light scattering in microcrystalline silicon thin films and solar cells / A. Poruba, A. Fejfar // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol. 88. – P. 148–160.
22. Rowlands, S. F. Optical modelling of thin film solar cells with textured interfaces using the effective medium approximation / S. F. Rowlands, J. Livingstone, C. P. Lund // *Solar Energy*. – 2004. – Vol. 76, N 1/3. – P. 301–307.
23. Springer, J. Improved three-dimensional optical model for thin-film silicon solar cells / J. Springer, A. Poruba // *J. Appl. Phys.* – 2004. – Vol. 96. – P. 5329–5337.
24. Zeman, M. Optical modeling of a-Si:H solar cells with rough interfaces: Effect of back contact and interface roughness / M. Zeman, R. Vanswaaij // *J. Appl. Phys.* – 2000. – Vol. 88. – P. 6436–6443.
25. Krc, J. Experimental investigation and modelling of light scattering in a-Si:H solar cells deposited on glass/ZnO:Al substrates / J. Krc, M. Zeman // *Mater. Res. Soc.* – 2002. – Vol. 715. – P. A13.3.1–A13.3.6.
26. Leblanc, F. Numerical modeling of the optical properties of hydrogenated amorphous-silicon-based *p-i-n* solar cells deposited on rough transparent conducting oxide substrates / F. Leblanc, J. Perrin // *J. Appl. Phys.* – 1994. – Vol. 75. – P. 1074.
27. Sahraei, N. Investigation of the Optical Absorption of a-Si:H Solar Cells on Micro- and Nano-Textured Surfaces / N. Sahraei [et al.] // *Energy Procedia*. – 2013. – Vol. 33. – P. 166–172.
28. Рыков, А. С. Сканирующая зондовая микроскопия полупроводниковых материалов и наноструктур / А. С. Рыков. – СПб.: Наука, 2001. – 52 с.
29. Станчик, А. В. Фазовый анализ электроосажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn для солнечных элементов на основе $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ / А. В. Станчик, С. А. Башкиров, В. Ф. Гременок // *Физ. образование в вузах*. – 2016. – Т. 22, №1. – С. 137С–138С.
30. Roughness parameters / E. S. Gademawla [et al.] // *J. Mater. Process. Technol.* – 2002. – Vol. 123. – P. 133–145.
31. Das, S. Growth, fabrication and characterization of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ photovoltaic absorber and thin-film heterojunction solar cells: Diss. Master of Engineering: 08.09.14 / S. Das. – Columbia, 2014. – 106 p.
32. Морфология и топология электроосажденных прекурсоров Cu-Zn-Sn для солнечных элементов на основе $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ / А. В. Станчик [и др.] // *Физ. образование в вузах*. – 2016. – Т. 22, № 1. – С. 106С–107С.
33. Tashlykov, I. S. Elemental composition, topography, and wettability of the surface of graphite modified by ion-assisted deposition of chromium coatings / I. S. Tashlykov, S. M. Baraishuk // *Russ. J. Non-Ferrous Metals*. – 2008. – Vol. 49, N 4. – P. 303–307.
34. Tashlykov, I. S. Composition, structure and surface morphology of silicon modified by ion dynamic mixing / I. Tashlykov, S. Baraishuk, O. Mikkalkovich, I. Antonovich // *Przeglad Elektrotechniczny*. – 2008. – Vol. 84, N 3. – P. 111–113.

References

1. Green M.A., Emery K., Hishikawa Y., Warta W., Dunlop E.D. Solar cell efficiency tables (version 48). *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2016, vol. 24, pp. 905–913. doi: 10.1002/pip.2788.
2. Green M.A. Estimates of te and in prices from direct mining of known ores. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2009, vol. 17, no. 5, pp. 347–359. doi: 10.1002/pip.899.
3. Fthenakis V.M., Moskowitz P.D. Toxic Materials Released from Photovoltaic Modules During Fires: Health Risks. *Solar Cells*, 1995, vol. 29, no. 1, pp. 63–71. doi:10.1016/0379-6787(90)90015-W.

4. Paranthaman M.P., Wong-Ng W., Bhattacharya R.N. (eds.) *Semiconductor Materials for Solar Photovoltaic Cells*. Switzerland: Springer International Publishing, 2016, p. 25. doi: 10.1007/978-3-319-20331-7.
5. Mikli V., Hiie J., Valdna V., Viljus M., Traksmaa R., Kallavus, U. Formation of structure of the CdTe film, recrystallized on Mo/glass substrate under high temperature and mechanical pressure. *Thin Solid Films*, 2009, vol. 517, no. 7, pp. 2252–2255. doi: 10.1016/j.tsf.2008.10.102.
6. Toshiyuki Y., Yukio Y., Akira Y. Characterization of Cu(In,Ga)Se₂ thin films prepared by thermal crystallization on Mo/glass substrate. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2001, vol. 67, no. 1–4, pp. 77–82. doi: 10.1016/S0927-0248(00)00265-8.
7. Klossek A., Krause C., Arguirov T., Krause H.M., Seifert W., Friedrich F., Kittler M. Characterization of thin-film a-Si:H/μc-Si:H tandem solar cells on glass substrates. *Crystal Research and Technology*, 2013, vol. 48, no. 5, pp. 279–286. doi: 10.1002/crat.201200489.
8. Guan H., Hou H., Yu F., Li L. Synthesis of wurtzite Cu₂ZnSnS₄ thin films directly on glass substrates by the solvothermal method. *Materials Letters*, 2015, vol. 159, pp. 200–203. doi: 10.1016/j.matlet.2015.06.049.
9. Schock, H.-W. *Properties of Chalcopyrite-Based Materials and Film Deposition for Thin Film Solar Cells*. Berlin, Springer Series in Photovoltaics, 2004. 259 p.
10. Pagliaro M., Palmisano G., Ciriminna R. *Flexible Solar Cells*. Weinheim, WILEY-VCH, 2008, p. 190. doi: 10.1002/9783527623808.
11. Seifart K., Schmidt T., Göhler W., Langlois S. Structural Design of Flexible Solar Generators. *Proceedings of the 7th European Space Power Conference*. Stresa, Italy, 2005, pp. 200–210.
12. Otte K., Makhova L., Braun A., Kononov I. Flexible Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells for space application. *Thin Solid Films*, 2006, vol. 511 – 512, pp. 613–622. doi: 10.1016/j.tsf.2005.11.068.
13. Petrushev A.S. Improving the efficiency of solar cells by a uniaxial tracker and acrylic hub. *Sovremennye tekhnika i tekhnologii : sbornik trudov XX mezhdunarodnoi nauchno-prakticheskoi konferentsii studentov, aspirantov i molodykh uchenykh. T. I* [Modern Techniques and Technologies: a collection of the works of XX international scientific-practical conference of students, graduate students and young scientists. Vol. 1]. Tomsk, Publisher of the Tomsk Polytechnic University, 2014, pp. 37–38. (in Russian)
14. Ward J.S., Ramanathan K., Hasoon F.S., Coutts T.J., Keane J., Contreras M.A., Noufi R. A 21.5% efficient Cu(In,Ga)Se₂ thin-film concentrator solar cell. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2002, vol. 10, no. 1, pp. 41–45. doi: 10.1002/pip.424.
15. Batchelor W.K., Repins I.L., Schaefer J., Beck, M.E. Impact of substrate roughness on CuIn_xGa_{1-x}Se₂ device properties. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2004, vol. 83, no. 1, pp. 67–80. doi: 10.1016/j.solmat.2003.10.005.
16. Satoh T., Hashimoto Y., Shimakawa S.I., Hayashi S., Negami T. CIGS solar cells on flexible stainless steel substrates. *Proceedings of the 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. Anaheim, CA, 2000, pp. 567–570. doi: 10.1109/PVSC.2000.915902.
17. Hartmann M., Schmidt M., Jasenek A., Schock H.W., Kessler F., Herz K., Powalla M. Flexible and Light Weight Substrates for Cu(In,Ga)Se₂ Solar Cells and Modules. *Proceedings of the 28th IEEE Photovoltaic Specialists Conference*. Anaheim, CA, 2000, pp. 638–642. doi: 10.1109/PVSC.2000.915924.
18. San Vicente G., Herrero J., Morales A., Gutierrez M.T., Hartmann M. The Application of Metallic Foils as Substrate for CIGS Thin Film Solar Cells. *17th European Photovoltaic Solar Energy Conference. Proceedings of the International Conference held in Munich, Germany*. London, UK, James & James Science Publishers Ltd, 2001, pp. 638–642.
19. Batchelor W.K. Substrate and Back Contact Effects in CIGS Devices on Steel Foil. *Proceedings of the 29th IEEE Photovoltaic Specialist's Conference*. New Orleans, 2002, p. 719. doi: 10.1109/PVSC.2002.1190665.
20. Huang J., Hu G., Orkoulas G., Christofides P.D. Dependence of Film Surface Roughness on Surface Migration and Lattice Size in Thin Film Deposition. *American Control Conference*. IEEE, 2011, pp. 2957–2962.
21. Poruba A., Fejfar A., Remeš Z., Špringer J., Vaněček M., Kočka J., Shah A. Optical absorption and light scattering in microcrystalline silicon thin films and solar cells. *Journal of Applied Physics*, 2000, vol. 88, pp. 148–160. doi: 10.1063/1.373635.
22. Rowlands S.F., Livingstone J., Lund C.P. Optical modelling of thin film solar cells with textured interfaces using the effective medium approximation. *Solar Energy*, 2004, vol. 76, no. 1–3, pp. 301–307. doi:10.1016/j.solener.2003.09.003.
23. Springer J., Poruba A., Vanecek M. Improved three-dimensional optical model for thin-film silicon solar cells. *Journal of Applied Physics*, 2004, vol. 96, pp. 5329–5337. doi: 10.1063/1.1784555.
24. Zeman M., Van Swaaij R.A.C.M.M., Metselaar J.W., Schropp R.E.I. Optical modeling of a-Si:H solar cells with rough interfaces: Effect of back contact and interface roughness. *Journal of Applied Physics*, 2000, vol. 88, pp. 6436–6443. doi:10.1063/1.1324690.
25. Krc J., Zeman M., Kluth O., Smole F. Experimental investigation and modelling of light scattering in a-Si:H solar cells deposited on glass/ZnO:Al substrates. *Material Research Society*, 2002, vol. 715, pp. A13.3.1–A13.3.6. doi: 10.1557/PROC-715-A13.3.
26. Leblanc F., Perrin J., Schmitt J. Numerical modeling of the optical properties of hydrogenated amorphous-silicon-based p-i-n solar cells deposited on rough transparent conducting oxide substrates. *Journal of Applied Physics*, 1994, vol. 75, p. 1074. doi: 10.1063/1.356489.
27. Sahraei N., Venkataraj S., Aberle A.G., Peters I.M. Investigation of the Optical Absorption of a-Si:H Solar Cells on Micro- and Nano-Textured Surfaces. *Energy Procedia*, 2013, vol. 33, pp. 166–172. doi:10.1016/j.egypro.2013.05.054.
28. Rykov A.S. *Scanning probe microscopy of semiconductor materials and nanostructures*. St. Petersburg, Nauka, 2001. 52 p. (in Russian)
29. Stanchik A.V., Bashkirov S.A., Gremenok V.F. Phase Analysis of Electrodeposited Cu-Zn-Sn Precursors for Solar Cells Based Cu₂ZnSnSe₄. *Fizicheskoe obrazovanie v vuzakh* [Physics in Higher Education], 2016, vol. 22, no. 1, pp. 137C–138C. (in Russian)

30. Gadelmawlaa E.S., Kourab M.M., Maksoudc T.M.A., Elewaa I.M., Soliman H.H. Roughness parameters. *Journal of Materials Processing Technology*, 2002, vol. 123, pp. 133–145. doi: 10.1016/S0924-0136(02)00060-2.

31. Das S. *Growth, fabrication and characterization of $Cu_2ZnSn(S_xSe_{1-x})_4$ photovoltaic absorber and thin-film hetero-junction solar cells*. Columbia, 2014. 106 p.

32. Stanchik A.V., Bashkirov S.A., Yakovenko Y.S., Gremenok V.F., Tashlykov I.S. Morphology and Typology of Electro-deposited Cu-Zn-Sn Precursors for Solar Cells Based on $Cu_2ZnSnSe_4$. *Fizicheskoe obrazovanie v vuzakh* [Physics in Higher Education], 2016, vol. 22, no. 1, pp. 106C–107C. (in Russian)

33. Tashlykov I.S., Baraishuk S.M. Elemental composition, topography, and wettability of the surface of graphite modified by ion-assisted deposition of chromium coatings. *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*, 2008, vol. 49, no. 4, pp. 303–307. doi: 10.3103/S1067821208040172.

34. Tashlykov I., Baraishuk S., Mikkalkovich O., Antonovich I. Composition, structure and surface morphology of silicon modified by ion dynamic mixing. *Przeglad Elektrotechniczny*, 2008, vol. 84, no 3, pp. 111–113.

Информация об авторах

Станчик Алёна Викторовна – аспирант, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: alena.stanchik@bk.ru

Барайшук Сергей Михайлович – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой практической подготовки студентов, Белорусский государственный аграрный технический университет (пр. Независимости, 99, 220023, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: bear_s@rambler.ru

Башкиров Семён Александрович – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: disput@yandex.by

Гременок Валерий Феликсович – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией физики твердого тела, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: gremenok@ifftp.bas-net.by

Тиванов Михаил Сергеевич – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой энергофизики, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: tivanov@bsu.by

Дергачева Маргарита Борисовна – доктор химических наук, Институт топлива, катализа и электрохимии им. Д. В. Сокольского (ул. Кунаева, 142, 050010, г. Алматы, Республика Казахстан). E-mail: m_dergacheva@mail.ru

Уразов Кажмухан Аманкелдиевич – аспирант, Казахстанско-Британский технический университет (ул. Толе би, 59 050010, г. Алматы, Республика Казахстан). E-mail: u_kazhm@mail.ru

Для цитирования

Исследование тонких пленок $Cu_2ZnSnSe_4$ методом атомно-силовой микроскопии / А. В. Станчик [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 67–75.

Information about the authors

Stanchik Alena Viktorovna – Postgraduate, Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: alena.stanchik@bk.ru

Baraishuk Sergey Mikhailovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Department of Practical Training of Students, Belarusian State Agrarian Technical University (99, Nezavisimosti Ave., 220023, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: bear_s@rambler.ru

Bashkirov Semen Aleksandrovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Researcher, Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: disput@yandex.by

Gremenok Valery Feliksovich – D. Sc. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Solid State Physics, Scientific-Practical Materials Research Centre of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gremenok@ifftp.bas-net.by

Tivanov Mikhail Sergeevich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Energy Physics Department, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: tivanov@bsu.by

Dergacheva Margarita Borisovna – D. Sc. (Chemistry), Sokolsky Institute of Fuel, Catalysis and Electrochemistry (142, Kuanev Str., 050010, Almaty, Kazakhstan). E-mail: m_dergacheva@mail.ru

Urazov Kazhmukhzan Amankeldievich – Postgraduate, Kazakh-British Technical University (59, Tole bi Str., 050010, Almaty, Kazakhstan). E-mail: u_kazhm@mail.ru

For citation

Stanchik A.V., Barajshuk S.M., Bashkirov S.A., Gremenok V.F., Tivanov M.S., Dergacheva M.B., Urazov K.A. Investigation of $Cu_2ZnSnSe_4$ thin films by atomic force microscopy. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 67–75. (in Russian)

В. Г. Гуртовой, А. У. Шелег

*Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению,
Минск, Беларусь*

ИЗМЕНЕНИЕ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЭЛЕКТРОННОГО ОБЛУЧЕНИЯ

В интервале температур 100–300 К на частотах измерительного поля 10^3 – 10^6 Гц проведены исследования электропроводности и диэлектрической проницаемости монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, как необлученных, так и облученных электронами с энергией 4 МэВ дозами 10^{15} и 10^{16} см⁻². Показано, что абсолютные значения изученных характеристик возрастают при увеличении температуры. На кривых $\sigma = f(T)$ обнаружены участки с разным наклоном, что свидетельствует о наличии нескольких типов проводимости в исследованных полупроводниках. Выявлена дисперсия диэлектрических свойств исследованных монокристаллов: с ростом частоты значения диэлектрической проницаемости уменьшаются, а удельной электропроводности – увеличиваются. Обнаружено существенное влияние облучения электронами на электропроводность и диэлектрическую проницаемость исследованных монокристаллов. Увеличение дозы облучения приводит к уменьшению диэлектрической проницаемости и значительному возрастанию электропроводности во всей исследованной области температур.

Ключевые слова: четверные полупроводники, диэлектрическая проницаемость, удельная электропроводность, электронное облучение, дисперсия, низкотемпературные исследования.

V. G. Hurtavy, A. U. Sheleg

Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

CHANGE IN THE $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ SINGLE CRYSTALS DIELECTRIC PROPERTIES INDUCED BY ELECTRON IRRADIATION

The quaternary compound $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ was synthesized by the one-temperature method from the elementary components. Single crystals of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ were grown by chemical gas-transmission. Samples were prepared in the form of plane single-crystal plates with a size of more than $2 \times 5 \times 0.5$ mm. The electrical conductivity and dielectric properties of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals are investigated in the temperature range 100–300 K at the measuring field frequencies of 10^3 – 10^6 Hz. Non-irradiated samples and those irradiated by electrons with an energy of 4 MeV and doses of 10^{15} and 10^{16} cm⁻² are studied. It is shown that the absolute values of the studied characteristics increase with temperature. The curves $\sigma = f(T)$ have the areas with different slopes, which indicates the presence of several types of conduction in the investigated semiconductors. The dispersion of the dielectric properties of the studied single crystals is revealed: as the frequency is increased, dielectric constant values decrease and, as electrical conductivity is increased, these values grow. Increasing the radiation decreases dielectric permittivity and causes a significant growth of electrical conductivity in the entire investigated temperature range.

Keywords: quaternary semiconductors, dielectric constant, electrical conductivity, electron irradiation, low-temperature investigations.

Введение. В настоящее время перспективными материалами для использования в качестве базовых слоев преобразователей солнечного излучения считаются твердые растворы $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$, $\text{CuIn}(\text{S}, \text{Se})_2$, $\text{CuGa}(\text{S}, \text{Se})_2$, которые, в отличие от кремния, являются прямозонными полупроводниками и обладают большим коэффициентом поглощения в видимой и ближней ИК-области спектра. Последние исследования этих систем показали, что, применяя твердые растворы $\text{Cu}(\text{In}, \text{Ga})\text{Se}_2$ в качестве базовой основы фотопреобразователей солнечного излучения, можно получить КПД ~ 20,8–21,7 % [1, 2]. Однако использовать такие материалы на практике оказалось не выгодным в силу высокой стоимости индия и галлия и ограниченности их земных запасов. Четверные соединения $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ и $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ в этом отношении представляют значительный интерес, так как являются прямозонными полупроводниками, в которых вместо дорогостоящих индия и галлия используются более распространенные и дешевые цинк и олово.

В последние годы в литературе появилось достаточно много публикаций, посвященных как получению указанных материалов и исследованию их физических свойств, так и их применению в солнечной энергетике [3–11]. Однако, несмотря на большое количество работ и быстрый прогресс

в этом направлении, КПД солнечных элементов на основе $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ к настоящему времени получен на уровне $\sim 11,1\text{--}12,6\%$ [12]. Причина низкой эффективности состоит в том, что существующие технологии не позволяют создавать тонкие пленки на основе этих материалов с высоким качеством структуры и необходимыми для солнечных элементов фотоэлектрическими свойствами.

Поскольку данные материалы могут использоваться в качестве базовых слоев преобразователей солнечного излучения, возникает вопрос об их радиационной стойкости к ионизирующим излучениям, поэтому целью данной работы было установление закономерностей изменения диэлектрических характеристик монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ от температуры и дозы электронного облучения.

Технология получения образцов и методика эксперимента. Для синтеза четверных соединений $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ использовали однетемпературный метод, обеспечивающий чистоту получаемого вещества и отсутствие потерь компонентов. Исходными веществами служили элементарные компоненты полупроводниковой чистоты: медь, цинк и олово чистоты 99,999 %, сера марки ОСЧ. Синтез проводили в двойных кварцевых ампулах. Исходные компоненты в соотношениях, соответствующих формульному составу, в количестве ~ 15 г загружали в ампулу, после чего ее вакуумировали. Эту ампулу помещали в другую вакуумированную ампулу, которую опускали в вертикальную однозонную печь. Температуру в печи поднимали поэтапно с двухчасовой выдержкой до значений, на $20\text{--}30$ °С превышающих температуру плавления соединения. При достижении нужной температуры включали вибрационное перемешивание и выдерживали в течение 4 ч. Затем вибрацию отключали и уменьшали температуру со скоростью 5 К/ч до полного затвердения состава. Для гомогенизации полученных слитков твердых растворов проводили их изотермический отжиг в вакууме при 750 °С в течение 300 ч.

Монокристаллы $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ выращивались методом химических газотранспортных реакций из синтезированных ранее поликристаллических слитков. В качестве газа-переносчика применяли элементарный йод марки В5. Синтезированные поликристаллы растирали в порошок и использовали в качестве исходного материала для газотранспорта. Ампулу с исходным материалом и йодом помещали в горизонтальную печь с двумя независимо регулируемым зонами для создания необходимого градиента температур вдоль ампулы. Температуру в печи регулировали так, чтобы в зоне кристаллизации она достигала ~ 700 °С, а в зоне реакции ~ 780 °С. При этих условиях происходил рост монокристаллов в течение ~ 8 сут.

Измерения диэлектрической проницаемости (ϵ) и электропроводности (σ) монокристаллических образцов проводили методом плоского конденсатора на монокристаллических пластинках с размерами $\sim 2,0 \times 5,0 \times 0,5$ мм вдоль кристаллографического направления [001] с помощью цифрового измерителя Е7-20 на частотах измерительного поля $10^3\text{--}10^6$ Гц в температурном диапазоне 100–300 К. На образцы наносили омические серебряные контакты и помещали их между металлическими прижимными контактами. Держатель с образцом экранировали латунным стаканом, на который через изоляционную прослойку из слюды наматывали нагреватель. Питание нагревателя осуществлялось постоянным током от стабилизированного источника. Температура контролировалась при помощи дифференциальной хромель-копелевой термопары и универсального цифрового вольтметра. Для измерений использовали метод непрерывного квазистатического нагревания со скоростью $\sim 0,5$ К/мин. Точность измерения температуры составляла 0,1–0,2 К, погрешность измерений диэлектрических характеристик $\sim 0,5\%$. Значения диэлектрической проницаемости и удельной электропроводности рассчитывались по формуле, соответствующей плоскопараллельному конденсатору.

Проводились исследования как необлученных, так и облученных электронами образцов с энергией 4 МэВ дозами 10^{15} и 10^{16} см⁻².

Результаты исследований и их анализ. Исследованы диэлектрические характеристики полученных монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ в интервале температур 100–300 К на различных частотах измерительного поля вдоль кристаллографического направления [001].

На рис. 1 приведены кривые температурных зависимостей диэлектрической проницаемости (*a*) и удельной электропроводности (*b*) необлученных монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$. Как видно, значения ϵ

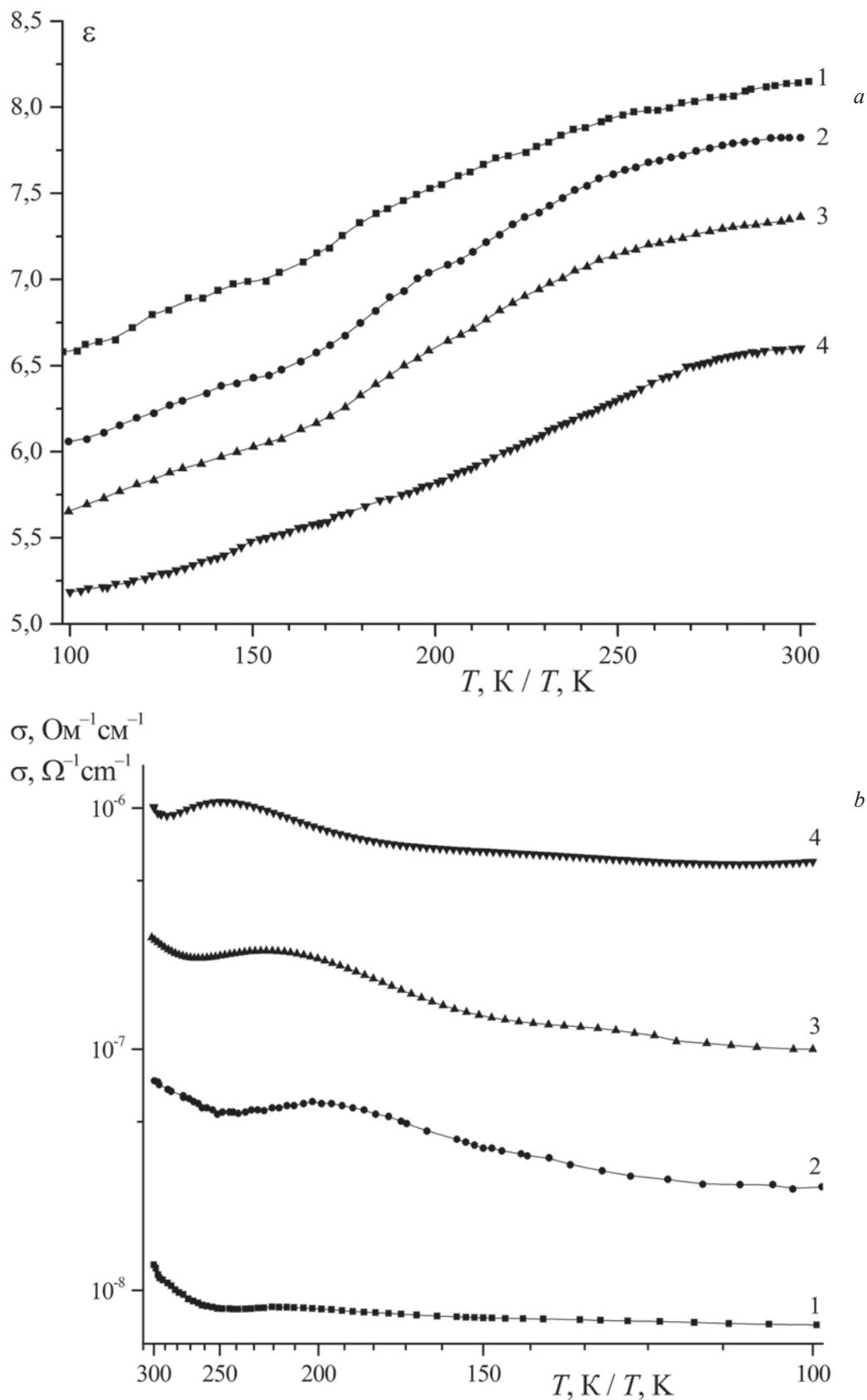


Рис. 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости (a) и удельной проводимости (b) монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ на частотах: 1 – 10^3 Гц; 2 – 10^4 Гц; 3 – 10^5 Гц; 4 – 10^6 Гц

Fig 1. Temperature dependences of dielectric constant (a) and conductivity (b) of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals on frequencies: 1 – 10^3 Hz; 2 – 10^4 Hz; 3 – 10^5 Hz; 4 – 10^6 Hz

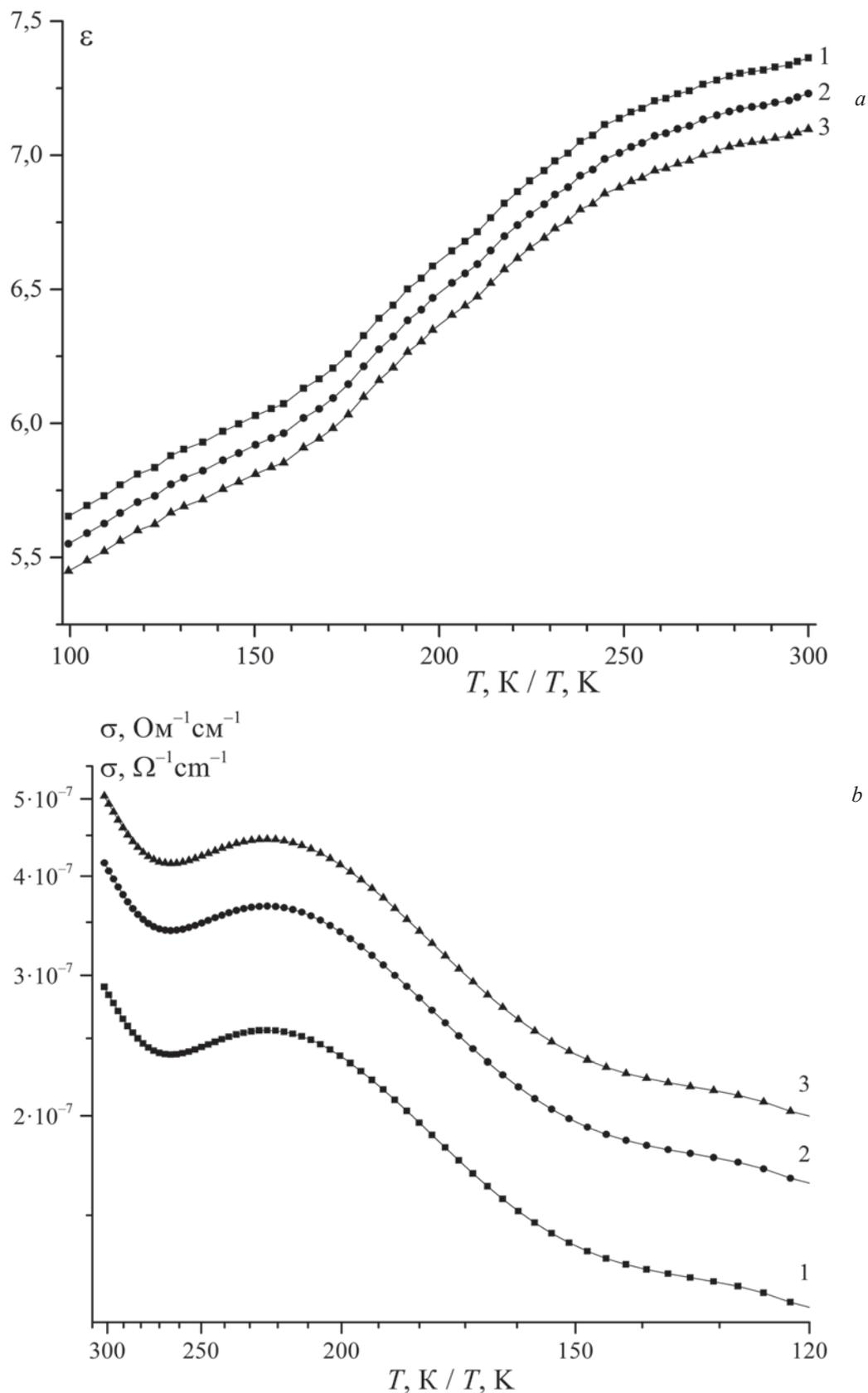


Рис. 2. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости (a) и удельной проводимости (b) монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ на частоте 10^5 Гц для доз облучения: 1 – без облучения; 2 – 10^{15} cm^{-2} ; 3 – 10^{16} cm^{-2}

Fig 2. Temperature dependences of dielectric constant (a) and conductivity (b) of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals irradiated by doses: 1 – non irradiated; 2 – 10^{15} cm^{-2} ; 3 – 10^{16} cm^{-2}

и σ с ростом температуры увеличиваются, что объясняется ростом концентрации свободных носителей зарядов (проявление полупроводниковых свойств в результате повышения температуры). На кривых $\sigma = f(T)$ для всех частот в области температур 200–250 К наблюдаются максимумы, обусловленные изменением типа проводимости с прыжковой при низких температурах к собственной при высоких. Также наблюдается значительная дисперсия диэлектрической проницаемости ϵ и проводимости σ . С ростом частоты значения ϵ уменьшаются, что обусловлено, как известно, релаксационными процессами, происходящими в высокочастотной области измерений. Следует отметить, что абсолютные значения электропроводности сильно зависят от частоты измерительного электрического поля. Электропроводность с ростом частоты увеличивается на несколько порядков. Такое поведение электрических свойств монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$, так же как и наличие максимумов на кривых $\sigma = f(T)$, по-видимому, связано с особенностями строения кристаллической структуры, и, как следствие, сложным механизмом переноса заряда. Участки с разным наклоном на кривых температурных зависимостей электропроводности указывают на наличие нескольких типов проводимости в этих кристаллах.

На рис. 2 приведены температурные зависимости диэлектрической проницаемости и проводимости (a и b соответственно) монокристалла $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ для различных доз облучения на частоте измерительного поля 10^5 Гц. Температурные зависимости для других частот выглядят аналогично.

Из рис. 2 видно, что облучение монокристаллов пучком электронов приводит к уменьшению диэлектрической проницаемости и значительному возрастанию электропроводности во всей исследованной области температур. Такое поведение значений ϵ под воздействием облучения электронами может быть вызвано радиационно стимулированным старением образцов, связанным с активизацией процесса миграции естественных дефектов под влиянием облучения и приводящим к снижению значений ϵ [13]. Причиной роста значений электропроводности σ монокристаллов соединений $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ является, скорее всего, увеличение концентрации дефектов и, как следствие, возрастания вклада примесной проводимости.

Заключение. Приведены результаты исследования влияния температуры и дозы электронного облучения на диэлектрическую проницаемость и удельную электропроводность монокристаллов четверных соединений $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$. Обнаружена значительная дисперсия изученных свойств: с ростом частоты значения диэлектрической проницаемости уменьшаются, а электропроводности – увеличиваются. На кривых $\sigma = f(T)$ обнаружены участки с разным наклоном, что свидетельствует о наличии нескольких типов проводимости в исследованных полупроводниках. Выявлено существенное влияние облучения электронами на электропроводность и диэлектрическую проницаемость исследованных монокристаллов. Увеличение дозы облучения приводит к уменьшению диэлектрической проницаемости и значительному возрастанию электропроводности во всей исследованной области температур.

Список использованных источников

1. Compositional investigation of potassium doped $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells with efficiencies up to 20.8 % / P. Jackson [et al.] // *Phys. Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*. – 2014. – Vol. 8, N 3. – P. 219–222.
2. Properties of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells with new record efficiencies up to 21.7% / P. Jackson [et al.] // *Phys. Status Solidi (RRL)*. – 2015. – Vol. 9, N 1. – P. 28–31.
3. The role of structural properties on deep defect states in $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ studied by photoluminescence spectroscopy / M. Grossberg [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 101, N 10. – P. 102102–102104.
4. Lydia, R. Sreedhara Reddy P. Structural and Optical Properties of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ Nanoparticles for Solar Cell Applications / R. Lydia // *J. Nano- and Electron. Phys.* – 2013. – Vol. 5, N 3. – P. 03017-1–03017-4.
5. Optical properties of high quality $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films / F. Luckert [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2011. – Vol. 99, N 6. – P. 062104.
6. Spectroscopic ellipsometry study of $\text{Cu}_2\text{ZnGeSe}_4$ and $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ poly-crystals / M. Leon [et al.] // *Mater. Chem. Phys.* – 2013. – Vol. 141, N 1. – P. 58–62.
7. Compositionally Tunable Photoluminescence Emission in $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_4$ Nanocrystals / A. Singh [et al.] // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2013. – Vol. 52, N 35. – P. 9120–9124.
8. Beyond 11% Efficiency: Characteristics of State-of-the-Art $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$ Solar Cells / T. K. Todorov [et al.] // *Advanced Energy Materials*. – 2013. – Vol. 3, N 1. – P. 34–38.
9. Кристаллографические и оптические характеристики тонких пленок твердых растворов $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ / А. У. Шелег [и др.] // *Журн. приклад. спектроскопии*. – 2014. – Т. 81, № 5. – С. 704–709.

10. Определение структурных и оптических характеристик тонких пленок полупроводниковых соединений $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ / А. У. Шелег [и др.] // Физика и техника полупроводников. – 2014. – Т. 48, № 10. – С. 1332–1338.
11. Шелег, А. У. Получение и рентгенографические исследования твердых растворов $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ / А. У. Шелег, В. Г. Гуртовой, В. А. Чумак // Кристаллография. – 2015. – Т. 60, № 5. – С. 826–830.
12. Device characteristics of CZTSSe thin-film solar cells with 12.6% efficiency / W. Wang [et al.] // Adv. Energy Mat. – 2014. – Vol. 4, N 7. – P. 36–45.
13. Пешиков, Е. В. Радиационные эффекты в сегнетоэлектриках / Е. В. Пешиков. – 2-е изд. – Ташкент: Фан, 1986. – 138 с.

References

1. Jackson P., Hariskos D., Wuerz R., Wischmann W., Powalla M. Compositional investigation of potassium doped $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells with efficiencies up to 20.8%. *Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 2014, vol. 8, no. 3, pp. 219–222. doi: 10.1002/pssr.201409040.
2. Jackson P., Hariskos D., Wuerz R., Kiowski O., Bauer A., Friedlmeier T.M., Powalla M. Properties of $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells with new record efficiencies up to 21.7%. *Physica Status Solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 2015, vol. 9, no. 1, pp. 28–31. doi: 10.1002/pssr.201409520.
3. Grossberg M., Krustok J., Raudoja J., Raadik T. The role of structural properties on deep defect states in $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ studied by photoluminescence spectroscopy. *Applied Physics Letters*, 2012, vol. 101, no. 10, pp. 102102–102104. doi: 10.1063/1.4750249.
4. Lydia R., Sreedhara Reddy P. Structural and Optical Properties of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ Nanoparticles for Solar Cell Applications. *Journal of Nano- and Electronic Physics*, 2013, vol. 5, no. 3, pp. 03017-1–03017-4.
5. Luckert F., Hamilton D.I., Yakushev M.V., Beattie N.S., Zoppi G., Moynihan M., Forbes I., Karotki A.V., Mudryi A.V., Grossberg M., Krustok J., Martin R.W. Optical properties of high quality $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films. *Applied Physics Letters*, 2011, vol. 99, no. 6, p. 062104. doi:10.1063/1.3624827.
6. Leon M., Levchenko S., Serna R., Nateprov A., Gurieva G., Merino J.M., Schorr S., Arushanov E. Spectroscopic ellipsometry study of $\text{Cu}_2\text{ZnGeSe}_4$ and $\text{Cu}_2\text{ZnSiSe}_4$ poly-crystals. *Materials Chemistry and Physics*, 2013, vol. 141, no. 1, pp. 58–62. doi:10.1016/j.matchemphys.2013.04.024.
7. Singh A., Singh S., Levchenko S., Unold T., Laffir F., Ryan K.M. Compositionally Tunable Photoluminescence Emission in $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ Nanocrystals. *Angewandte Chemie International Edition*, 2013, vol. 52, no. 35, pp. 9120–9124. doi: 10.1002/anie.201302867.
8. Todorov T.K., Tang J., Bag S., Gunawan O., Gokmen T., Zhu Y., Mitzi D.B. Beyond 11% Efficiency: Characteristics of State-of-the-Art $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$ Solar Cells. *Advanced Energy Materials*, 2013, vol. 3, no. 1, pp. 34–38. doi: 10.1002/aenm.201200348.
9. Sheleg A.U., Hurtavy V.G., Mudryi A.V., Zhivulko V.D., Valakh M.Y., Yuhimchuk V.A., Babichuk I.S., Xie H., Saucedo E. Crystallographic and Optical Characteristics of Thin Films of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ Solid Solutions. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2014, vol. 81, no. 5, pp. 776–781. doi:10.1007/s10812-014-0005-8.
10. Sheleg A.U., Hurtavy V.G., Mudryi A.V., Valakh M.Y., Yuhimchuk V.O., Babichuk I.S., Leon M., Caballero R. Determination of the structural and optical characteristics of $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ semiconductor thin films. *Semiconductors*, 2014, vol. 48, no. 10, pp. 1296–1302. doi:10.1134/S1063782614100273.
11. Sheleg A.U., Hurtavy V.G., Chumak V.A. Synthesis and X-ray diffraction study of $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_x\text{Se}_{1-x})_4$ solid solutions. *Crystallography Reports*, 2015, vol. 60, no. 5, pp. 758–762. doi:10.1134/S1063774515040203.
12. Wang W., Winkler M.T., Gunawan O., Gokmen T., Todorov T.K., Zhu Y., Mitzi D.B. Device characteristics of CZTSSe thin-film solar cells with 12.6% efficiency. *Advanced Energy Materials*, 2014, vol. 4, no. 7, pp. 36–45. doi: 10.1002/aenm.201301465.
13. Peshikov E.V. *The Radiation Effects in Semiconductors*. 2nd ed. Tashkent, Fan Publ., 1986. 138 p. (in Russian)

Информация об авторах

Гуртовой Виталий Геннадьевич – научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: hurtavy@physics.by

Шелег Александр Устинович – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, Научно-практический центр Национальной академии наук Беларуси по материаловедению (ул. П. Бровки, 19, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: sheleg@physics.by

Для цитирования

Гуртовой, В. Г. Изменение диэлектрических свойств монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ под действием электронного облучения / В. Г. Гуртовой, А. У. Шелег // Вест. Нац. акад. наук Беларуси. Сер. физ.-мат. наук. – 2016. – № 4. – С. 76–81.

Information about the authors

Hurtavy Vitali Gennadievich – Researcher, Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: hurtavy@physics.by

Sheleg Alexander Ustinovich – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Chief Researcher, Scientific-Practical Materials Research Center of the National Academy of Sciences of Belarus (19, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: sheleg@physics.by

For citation

Hurtavy V.G., Sheleg A.U. Change in the $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals dielectric properties induced by electron irradiation. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 76–81. (in Russian)

I. A. Popov¹, A. V. Shchelchkov¹, A. N. Skrypnik¹, N. N. Zubkov²,
Yu. V. Zhukova³, A. D. Chorny³, S. A. Sverchkov³

¹Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev, Kazan, Russia

²Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia

³A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

NUMERICAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF HYDRAULIC RESISTANCE OF TUBES WITH INTERNAL HELICAL FINNING BY DEFORMING CUTTING

An object of investigation is a tube having helical fins on the internal surface and different geometric sizes. Investigation methods: experiments to obtain quantitative results hydraulic resistance of tubes with internal helical finning and to verify computational algorithm; numerical simulation to visualize the flow structure in the tube. Studies of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning over a wide range of operating and geometric parameters were made: $Re_D = 2 \cdot 10^3 \dots 2.5 \cdot 10^5$, under the variation of the angle of swirling $\alpha = 14\text{--}87^\circ$, the relative height of a protrusion $h/d = (25\text{--}87.5) \cdot 10^{-3}$, the relative axial pitch $p/d = 0.16\text{--}12.73$. It is revealed that the hydraulic resistance of tubes with helical finning increases by a factor of 1.1 to 11.7. The numerical simulation results showed that, as the angle of helical swirling is increased, in the near-wall layers the share of the circumferential velocity component increases and the share of the longitudinal component decreases. And since the finning height exceeds the boundary layer thickness, the hydraulic resistance grows.

Keywords: turbulence, hydraulic resistance, experiment, numerical simulation, tube, deforming cutting

И. А. Попов¹, А. В. Щелчков¹, А. Н. Скрыпник¹, Н. Н. Зубков²,
Ю. В. Жукова³, А. Д. Чорный³, С. А. Сверчков³

¹Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева, Казань, Россия

²Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия

³Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

ЧИСЛЕННОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ГИДРАВЛИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ТРУБ С ВНУТРЕННИМ СПИРАЛЬНЫМ ОРЕБРЕНИЕМ, НАНЕСЕННЫМ МЕТОДОМ ДЕФОРМИРУЮЩЕГО РЕЗАНИЯ

В данной работе объектом исследования являются трубы с внутренним спиральным оребрением с различными геометрическими размерами. Методы исследования: эксперимент – для получения количественных результатов по гидравлическому сопротивлению труб с внутренним спиральным оребрением и для верификации расчетного алгоритма; численное моделирование – для визуализации структуры течения в трубе. Изучено гидравлическое сопротивление труб с внутренним спиральным оребрением в широком диапазоне режимных и конструктивных параметров: $Re_D = 2 \cdot 10^3 \dots 2.5 \cdot 10^5$, при изменении угла закрутки $\alpha = 14\text{--}87^\circ$, относительной высоты выступов $h/d = (25\text{--}87.5) \cdot 10^{-3}$, относительного шага по оси $p/d = 0.16\text{--}12.73$. Выявлено увеличение гидравлического сопротивления труб с внутренним спиральным оребрением от 1,1 до 11,7 раза. Результаты проведенного численного моделирования показали, что с увеличением угла спиральной закрутки в пристеночных слоях доля окружной составляющей скорости увеличивается, а доля продольной составляющей скорости уменьшается. Так как высота оребрения превышает толщину пограничного слоя, то в результате растет гидравлическое сопротивление.

Ключевые слова: турбулентность, гидравлическое сопротивление, эксперимент, численное моделирование, труба, метод деформирующего резания.

In forced heat carrier flow in the tube from the tube inlet, dynamic boundary layers start forming at the walls; their thickness gradually grows with increasing the distance from the tube inlet. At a time, thermal boundary layers are formed, which hinder heat transfer between the tube and heat carrier. The thickness of temperature and dynamic layers is related as $\delta_{\text{temp}}/\delta_{\text{dyn}} \sim Pr^{-0.5}$. At some distance from the tube inlet boundary layers merge and flow becomes stabilized. To enhance heat transfer between the tube walls and the heat carrier, to perturb the boundary layer, or to decrease its thickness, or to control the boundary layer separation.

Heat transfer enhancement techniques can be divided into three types. The first type is concerned with active techniques requiring external power supply (induced vibration, acoustic action, boundary

layer scraping), the second type – passive methods not requiring external power supply, third type – combined methods assuming the use of two or more active /passive methods.

Many of heat transfer enhancement techniques include application with surface modification such as different kind of surface roughness on the tube inside or internally finned tubes. The thermal and hydraulic characteristics of tubes having helical fins on the internal surface – internal helical finning (for example, specially made ridging or helically corrugated internal surface) have been widely investigated over the last 30 years [1–11]. The installation of such designs allows a flow to be swirled in effort to make disturbances in the near-wall layers of heat carrier [1–11]. Most of the published experimental works are devoted to the possibility of industrial use of such tubes in shell-tube heat exchangers. This will permit one either to decrease the mass and size (metal consumption) of heat exchangers, or increase heat load per surface area at fixed overall sizes of the latter. The tubes with helical fins on the internal surface allows heat transfer coefficient to be increased due to disturbances made in the near-wall layers of heat carrier. However, at a time heat carrier flowing inside the tube becomes turbulent [4, 10–11].

As shown in [2–9], thermal and hydraulic characteristics of tubes with internal helical finning are insufficiently studied for the standard flow conditions of viscous liquids in industrial heat exchangers. The studies of hydraulic resistance of tubes with single-threaded internal helical finning [2–9] have been made over the range of $Re_D = 3 \cdot 10^3 \dots 1.2 \cdot 10^5$ for the transient and turbulent flow regions of heat carrier. Dimensional geometric parameters of internal helical finning – the ratio of a helical swirling pitch p to a tube diameter D and of a helical finning height h to a tube diameter D – was varied within $p/D = 0.14\text{--}1.2$ and $h/D = (6\text{--}88) \cdot 10^3$. The attempt to extend the range of the operating characteristics, namely, to make investigations at high Prandtl numbers $Pr_f = 10\text{--}90$ and low Reynolds numbers Re_D , ranging from $2 \cdot 10^3$ is outlined elsewhere in [10]. The maximum values of thermal efficiency reach $Nu/Nu_0 = 2\text{--}2.1$ at a comparable growth of hydraulic resistance $\xi/\xi_0 = 1.8\text{--}2.4$, as shown in [8].

A short review permits a conclusion to be made that, despite a significant amount of experimental works on tubes with single-threaded internal helical finning, additional studies should be made of flow structures over the wide Reynolds and Prandtl number range, as well as of geometric tube parameters. In particular, experiments were not made on the flow structure visualization in such tubes because of technical difficulties. To get information about the flow structure in tubes with internal helical finning, numerical simulation methods can be adopted.

It should be emphasized that, for adequate results to be obtained by numerical simulation methods, first, the computational algorithm must be verified by the problems having physical analogs; second, designed computational grids allowing for the geometry features of the object of investigation and allowing boundary layer flow must be correctly used; third, the correct approaches to close the Navier – Stokes equations must be correctly used, i. e., for the equations to be closed, the turbulence model must be correctly chosen.

Thus, the objective of this study is to conduct joint experimental and numerical research of hydraulic resistance and flow structure in heat carrier flow in tubes with internal helical finning. Experimental investigation will make it possible to obtain characteristics curves for the hydraulic resistance of tubes with internal helical finning for laminar, transient and turbulent flow regimes, as well as to determine optimal geometric parameters of tubes with internal helical finning depending on operating parameters at minimum hydraulic loss ξ/ξ_0 . Numerical simulation results will allow one to visualize the flow structure in tubes having different helical fins on the internal surface and to qualitatively explain the effects obtained.

1. Object of investigation. An object of investigation is a tube having helical fins on the internal surface and different geometric sizes. The basic geometric parameters of the object of investigation are shown in Fig. 1. The present work studies six tubes having single-threaded helical fins made on the internal surface by the deforming cutting technique combining at a time the processes of deforming and cutting the surface layers of the tube [12–13]. The copper tubes of inner diameter $D = 16$ mm and length $L = 800$ mm were investigated; thus, their relative length was $L/D = 50$, which is indicative of the fact that studies of heat transfer in such tubes must allow for the influence of the thermal entry length. The basic geometric parameters of tubes are cited in Table. Water at 20° ($Pr = 6.97$) served as heat carrier.

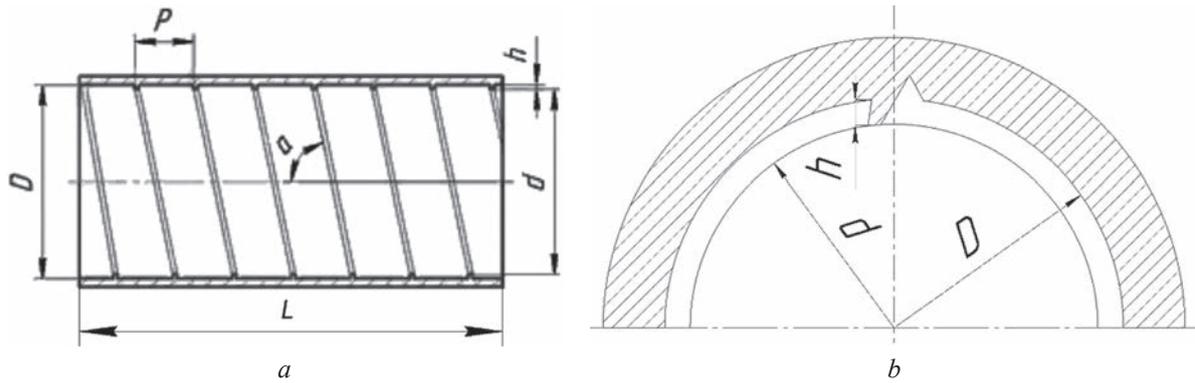


Fig. 1. Longitudinal (a) and transverse (b) sections of tubes with internal helical finning: D – diameter of a starting smooth tube d – deformed tube diameter taken from the height of an intensifier (helical protrusion), p – helical swirling pitch of an intensifier, h – height of an intensifier (helical protrusion), α – helical swirling angle, $\phi = \frac{h^2}{pd}$ – dimensionless parameter responsible for the influence of created swirling on flow characteristics

Basic geometric parameters of tubes under study

α°	$p, \text{ mm}$	$h, \text{ mm}$	d/D	$h/D \cdot 10^3$	p/D
14	198	1.4	0.825	87.5	12.73
32	80	0.6	0.925	37.5	5
46	48	0.7	0.913	43.75	3
61	28	0.7	0.913	43.75	1.75
76	12	0.4	0.95	25	0.75
87	2,5	0.7	0.913	43.75	0.16

2. Research techniques. Test bench for investigation of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning. The hydraulic scheme of the test bench (Fig. 2) is designed in the form of an open loop with a system of forced supply of heat carrier to the working (measuring) section. The test bench comprises the facilities of water storage 2 and water supply 3, 4 to working section 12, a piping, a measuring system of bulk (mass) flow rate by reference flowmeters 6, 7 and a control system.

Working section 12 for experimental study of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning is a channel with its inlet and outlet located on the axis. Heat carrier temperature at the working section inlet and outlet was controlled by chromel-alumel thermocouples 8, 9. To measure static pressure, 0.8 mm dia pressure taps were envisaged in connecting pipes at inlet 10 and outlet 11 respectively.

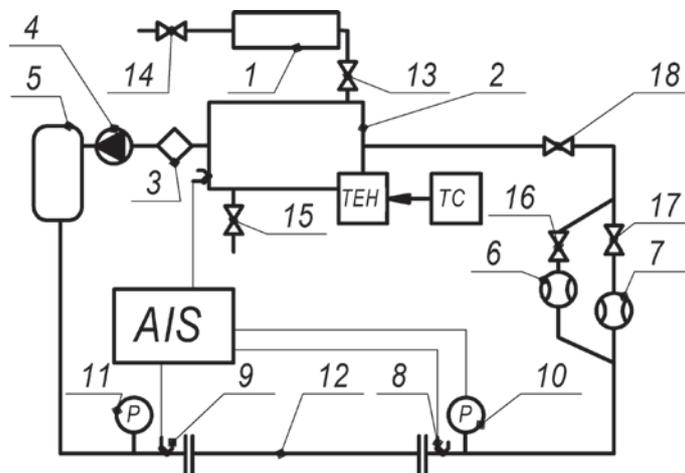


Fig. 2. Test bench for investigation of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning: 1 – distiller; 2 – tank-heater; 3 – filter; 4 – high pressure pump; 5 – receiver; 6, 7 – flowmeters; 8, 9 – thermocouples; 10, 11 – pressure sensors; 12 – working section; AIS – automated information system; TEH – tubular electric heater; TC – temperature controller; 13–17 – valves

Pressure drop on the working section was measured by OBEH pressure sensors for isothermal conditions of heat carrier flow.

Hydraulic resistance coefficient was determined by formula (1):

$$\xi = \frac{2\Delta p D}{\rho w^2 L}, \quad (1)$$

where Δp is the pressure drop on the working section, ρ is the heat carrier density, and w is the bulk velocity of heat carrier. A relative error in determining hydraulic resistance did not exceed 6.5 %.

Numerical simulation. Numerical simulation was performed with the use of gasdynamic solver ANSYS Fluent 14.5. Steady-state Reynolds-averaged Navier – Stokes equations (Reynolds equations) and the continuity equation were solved. The Reynolds equations were closed by the κ - ω Menter shear stress transfer model [14]. A medium moving in a tube was assumed to be incompressible and its thermophysical properties (density and viscosity) were assigned constant and independent of temperature and pressure.

A computational grid consisted of tetrahexagonal and hybrid elements closely packed near the tube finning. Total capacity of a computational grid was from 4 mln cells for a tube without finning to 8.5 mln cells for a tube with finning. A minimal size of a computational cell was $0.2 \cdot 10^{-3}$ m.

Massflow rate and operating pressure were assigned at the computational domain inlet; a tube inner surface was assumed to be smooth, on which no slip conditions were realized. Outflow boundary conditions were set at the computational domain outlet. Gravity was directed perpendicular to the incoming flow. In the course of numerical simulation, boundary conditions were predetermined to be consistent with experiment conditions.

3. Analysis of the results obtained. Analysis of the experimental data on hydraulic resistance of tubes with internal helical finning. Experiments on hydraulic resistance of tubes with single-threaded internal helical finning were performed within the turbulent regime of forced water flow over the Reynolds number range $Re_D = 2 \cdot 10^3 \dots 2.5 \cdot 10^5$ (Fig. 3). The experimental results obtained are compared with the data on a tube without internal helical finning and with those calculated by the formula $\xi_0 = 0.3164/Re^{0.25}$ (Blasius' law).

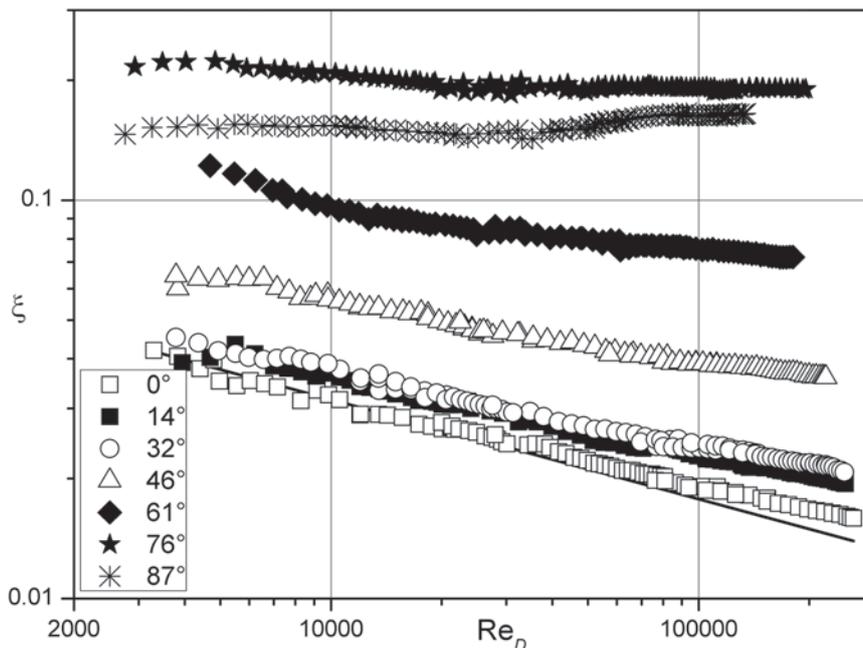


Fig. 3. Experimental data on hydraulic resistance: line – the calculation by the relation $\xi = 0.3164/Re^{0.25}$ for a tube without internal finning

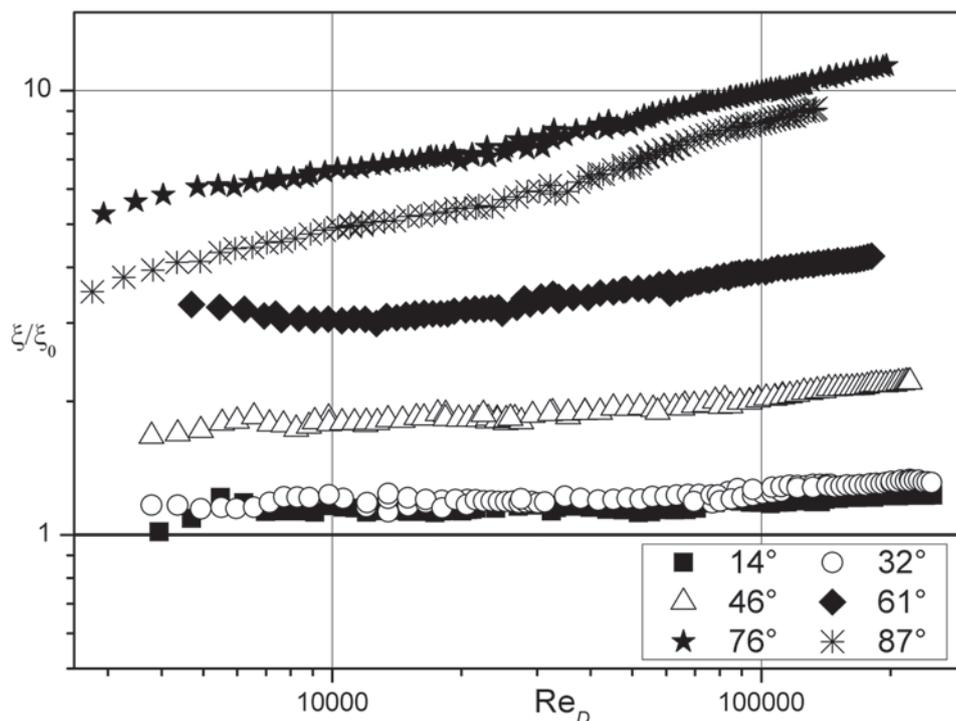


Fig. 4. Comparison of hydraulic resistance coefficients of tubes at different angles of swirling

To evaluate the adequacy of the data obtained, the experimental turbulent regime results of the authors of the present article and presented in Fig. 4 were compared with the data [10]. Comparison was made for a tube at an angle of swirling $\alpha = 46^\circ$ and for tube No. 08 [10], as well as for a tube at an angle of swirling $\alpha = 61^\circ$ and for tube No. 06 [10]. The comparison of the results yielded a satisfactory agreement; the disagreement did not exceed 5 %.

The analysis of the experimental results (Fig. 3) on tubes with internal helical finning revealed that the hydraulic resistance coefficients increased with increasing angle of swirling $\alpha = (14\text{--}87)^\circ$. It should be noted that the values of hydraulic resistance coefficient for tubes with $\alpha = 14^\circ$ and $\alpha = 32^\circ$ were close. A maximal increase in hydraulic resistance coefficient in the turbulent Reynolds number range was $\xi/\xi_0 = 11.7$ times in comparison with a smooth channel.

It should be noted (Fig. 4) that at $Re_D = 4500$, the ratio of hydraulic resistance coefficient of tubes with internal helical finning ξ to hydraulic resistance coefficient of tubes without finning ξ_0 is $\xi/\xi_0 = 1.05\text{--}1.1$ for a tube with an angle of fin twisting $\alpha = 14^\circ$; $\xi/\xi_0 = 1.1\text{--}1.15$ at $\alpha = 32^\circ$; $\xi/\xi_0 = 1.7\text{--}1.8$ at $\alpha = 46^\circ$; $\xi/\xi_0 = 3.0\text{--}3.1$ at $\alpha = 61^\circ$; $\xi/\xi_0 = 5.9\text{--}6.1$ at $\alpha = 76^\circ$; $\xi/\xi_0 = 3.95\text{--}4.05$ at $\alpha = 87^\circ$. Attention should be paid to the fact that the tubes with the angles of swirling $\alpha = 76^\circ$ and 87° (Fig. 3) are characterized by the similar behavior of hydraulic resistance over the Reynolds number range. At that, the hydraulic resistance coefficient ξ for a tube at the angle of swirling $\alpha = 76^\circ$ is 1.25 time larger than for a tube at $\alpha = 87^\circ$. To explain this phenomenon, the flow structure should be visualized. It can be assumed that, as the angle of swirling is increased and the axial pitch is decreased, the circumferential velocity component becomes much smaller than the axial one.

Analysis of numerical simulation results. Because of the difficulties associated both with flow structure visualization in the tube with internal helical finning and with effect explanations, particularly the similarity effect of hydraulic resistance in tubes with $\alpha = 14^\circ$, $\alpha = 32^\circ$, $\alpha = 46^\circ$ and $\alpha = 61^\circ$, as well as tubes with $\alpha = 76^\circ$ and $\alpha = 87^\circ$, numerical simulation results were adopted. The computational algorithm was preliminarily tested for flow in the tube without internal finning; the numerical simulation results were compared with the Blasius law $\xi_0 = 0.3164 Re^{-0.25}$. Over the Reynolds number range $3 \cdot 10^3\text{--}2.5 \cdot 10^5$ the numerical simulation results differed from the Blasius' law by 8–12%.

At small angles of helical swirling (Fig. 5, a) finning slightly influences the flow structure in the tube, as well as in the case of the tube without finning the following flow structure is formed: the velocity

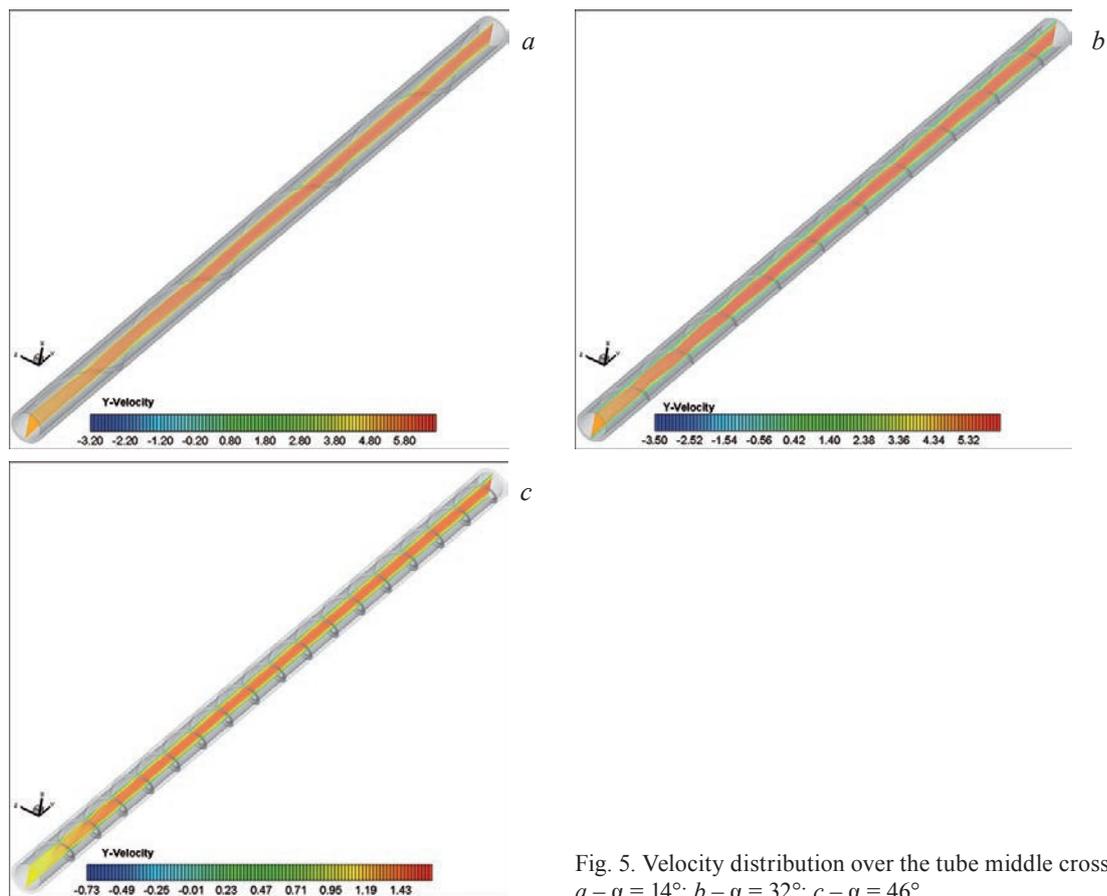


Fig. 5. Velocity distribution over the tube middle cross section: $a - \alpha = 14^\circ$; $b - \alpha = 32^\circ$; $c - \alpha = 46^\circ$

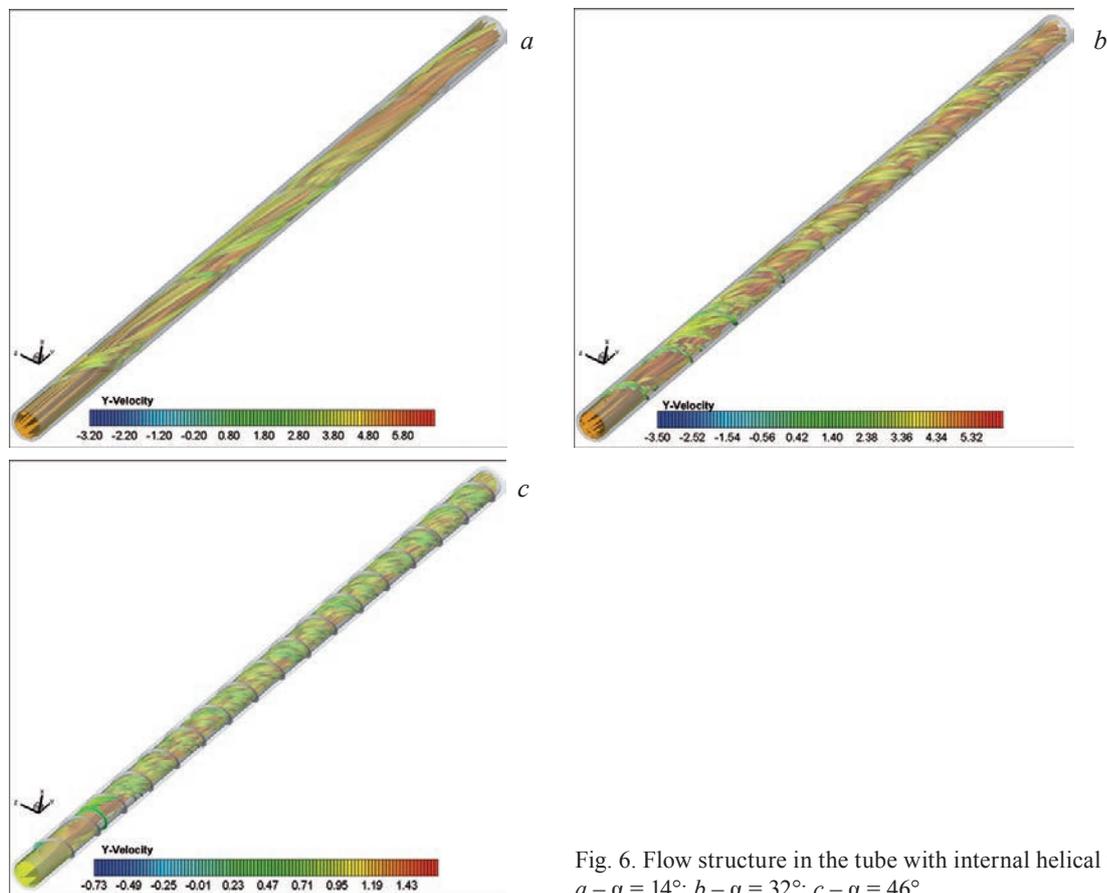


Fig. 6. Flow structure in the tube with internal helical finning: $a - \alpha = 14^\circ$; $b - \alpha = 32^\circ$; $c - \alpha = 46^\circ$

on the flow axis has a maximum value and it sharply changes near the wall [15]. Increasing the angle of helical swirling (Fig. 5, b, c) disturbs the boundary layer. As the finning height exceeds the boundary layer thickness, this results in a hydraulic resistance growth.

As previously mentioned, as the angle of helical finning (Fig. 6) is increased, in the near-wall layers the share of the circumferential velocity component increases and the share of the longitudinal velocity component decreases. Thus, tubes with a large angle of swirling and a small axial pitch can be considered as tubes with transverse rolling.

Conclusion. Studies of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning over a wide range of operating and geometric parameters were made: $Re_D = 2 \cdot 10^3 \dots 2.5 \cdot 10^5$, under the variation of the angle of swirling $\alpha = 14^\circ - 87^\circ$, the relative height of a protrusion $h/d = (25 - 87.5) \cdot 10^{-3}$, the relative axial pitch $p/d = 0.16 - 12.73$. It is revealed that the hydraulic resistance of tubes with helical finning increases by a factor of 1.1 to 11.7.

The numerical simulation results showed that, as the angle of helical swirling is increased, in the near-wall layers the share of the circumferential velocity component increases and the share of the longitudinal component decreases. And since the finning height exceeds the boundary layer thickness, the hydraulic resistance grows.

Acknowledgements

The authors are grateful to the Russian Foundation for Basic Research (grant 16-38-00066 mol_a, 14-08-00049), and the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (grant T16R-005) and to Elvira Zharkova for preparation and translation of the manuscript.

Благодарности

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (грант 16-38-00066 мол_а, 14-08-00049), Белорусскому республиканскому фонду фундаментальных исследований (грант № T16P-005) за финансовую поддержку и Э. А. Жарковой за подготовку и перевод рукописи.

References

1. Rabas T.J., Bergles A.E., Moen D.L. Heat transfer and pressure drop correlations for spirally grooved (rope) tubes used in surface condensers and multistage flash evaporators. *ASME Proceedings of the 1988 National Heat Transfer Conference*, Vol. 1. New York, ASME, 1988, pp. 693–704.
2. Mehta M.H., Raja Rao M. Investigations on heat transfer and frictional characteristic of enhanced tubes for condensers. *Advances in Enhanced Heat Transfer*. New York, ASME, 1979, pp. 11–21.
3. Gupta R.K., Raja Rao M. Heat transfer and friction characteristics of Newtonian and power law type of non-Newtonian fluids in smooth and spirally corrugated tubes. *Advances in Enhanced Heat Transfer*. New York, ASME, 1979, pp. 103–113.
4. Withers J.G. Tube-side heat transfer and pressure drop for tubes having helical internal ridging with turbulent/transitional flow of single phase fluid. Part I – Single-helix ridging. *Heat Transfer Engineering*, 1980, vol. 2, no. 1, pp. 48–58. doi:10.1080/01457638008962750.
5. Li H.M., Ye K.S., Tan Y.K., Deng S.J. Investigation of tube-side flow visualisation. Friction factor and heat transfer characteristics of helical-ridging tubes. *Proceedings of the 7 th Heat Transfer Conference*. Washington, Hemisphere Publishing Corp., 1998, pp. 75–80.
6. Ganeshan S., Raja Rao M. Studies on thermohydraulics of single and multi-start spirally corrugated tubes for water and time-dependent power law fluids. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1982, vol. 25, no. 7, pp. 1013–1022. doi:10.1016/0017-9310(82)90076-X.
7. Sethumadhavan R., Raja Rao M. Turbulent flow friction and heat transfer characteristics of single and multistart spirally enhanced tubes. *Journal of Heat Transfer*, 1982, vol. 108, no. 1, pp. 55–61. doi:10.1115/1.3246905.
8. Zimparov V.D., Vulchanov N.L., Delov L.B. Heat transfer and friction characteristics of spirally corrugated tubes for power plant condensers. 1. Experimental investigation and performance evaluation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 1991, vol. 34, no. 9, pp. 2187–2197. doi:10.1016/0017-9310(91)90045-G.
9. Ravigururajan T.S., Bergles A.E. Prandtl number influence on heat transfer enhancement in turbulent flow of water at low temperatures. *Journal of Heat Transfer*, 1995, vol. 117, no. 2, pp. 276–282. doi:10.1115/1.2822517.
10. Vicente P.G., Garcia A., Viedma A. Experimental investigation on heat transfer and frictional characteristics of spirally corrugated tubes in turbulent flow at different Prandtl numbers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, vol. 47, no. 4, pp. 671–681. doi: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2003.08.005.
11. Shchelchikov A. Thermohydraulic characteristics of discretely rough tubes for the transitional flow regime. *Heat Transfer Research*, 2016, vol. 47, no. 6, pp. 545–557. doi: 10.1615/HeatTransRes.2016010129.
12. Zubkov N.N., Ovchinnikov A.I., Kononov O.V. Manufacture of new-class heat transfer surfaces by deforming cutting. *Vestnik MGTU im. N.Je. Baumana. Serija "Mashinostroenie"* [Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Mechanical Engineering], 1993, no. 4, pp. 79–82.

13. Zubkov N.N. Finning of heat exchanger tubes by deforming and cutting of surface layers. *Novosti teplosnabzheniya* [Heating News], 2005, no. 4, pp. 51–53.
14. *Ansys Fluent 14.0 Tutorial Guide*. ANSYS, Inc. Southpointe, 2011. 1146 p.
15. Mikheev M.A., Mikheeva I.M. *Fundamentals of heat transfer*. Moscow, Energiya, 1977. 344 p.

Информация об авторах

Попов Игорь Александрович – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры теплотехники и энергетического машиностроения, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева – КАИ (ул. К. Маркса, 10, 420111, г. Казань, Российская Федерация). E-mail: popov-igor-alex@yandex.ru

Щелчков Алексей Валентинович – кандидат технических наук, доцент кафедры теплотехники и энергетического машиностроения, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева – КАИ (ул. К. Маркса, 10, 420111, г. Казань, Российская Федерация). E-mail: lexa_kzn@mail.ru

Скряпник Артем Николаевич – магистрант, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева – КАИ (ул. К. Маркса, 10, 420111, г. Казань, Российская Федерация). E-mail: skrart555@gmail.com,

Зубков Николай Николаевич – доктор технических наук, профессор кафедры «Инструментальная техника и технологии», Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана (2-я Бауманская ул., 5, строение 1, 105005, г. Москва, Российская Федерация). E-mail: zoubkovn@bmstu.ru

Жукова Юлия Владимировна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории турбулентности, Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: julia_zhukova@rambler.ru

Чорный Андрей Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией турбулентности, Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: anchor@hmti.ac.by

Сверчков Сергей Александрович – младший научный сотрудник лаборатории физико-химической гидродинамики, Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова Национальной академии наук Беларуси (ул. П. Бровки, 15, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: serge0788@hmti.ac.by

Для цитирования

Численное и экспериментальное исследование гидравлического сопротивления труб с внутренним спиральным оребрением, нанесенным методом деформирующего резания / И. А. Попов [и др.] // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 82–89.

Information about the authors

Popov Igor Aleksandrovich – D. Sc. (Engineering), Professor, Professor of the Heat Engineering and Power Engineering Department, Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev – KAI (10, K. Marx Str., 420111, Kazan, Russian Federation). E-mail: popov-igor-alex@yandex.ru

Shchelchkov Aleksei Valentinovich – Ph. D. (Engineering), Assistant Professor, Head of the Heat Engineering and Power Engineering Department, Kazan National Research Technical University named after A. N. Tupolev – KAI (10, K. Marx Str., 420111, Kazan, Russian Federation). E-mail: lexa_kzn@mail.ru

Scrypnik Artem Nikolaevich – Undergraduate, Kazan National Research Technical University named after A.N. Tupolev – KAI (10, K. Marx Str., 420111, Kazan, Russian Federation). E-mail: skrart555@gmail.com

Zubkov Nikolai Nikolaevich – D. Sc. (Engineering), Professor, Head of the Laboratory of the Research Institute of Structural Materials and Technological Processes, Bauman Moscow State Technical University (5, Building 1, 2nd Baumanskaya Str., 105005, Moscow, Russian Federation). E-mail: zoubkovn@bmstu.ru

Zhukova Yuliya Vladimirovna – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher, Laboratory of Turbulence, A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: julia_zhukova@rambler.ru

Chorny Andrei Dmitrievich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Laboratory of Turbulence, A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: anchor@hmti.ac.by

Sverchikov Sergei Aleksandrovich – Junior Researcher, Laboratory of Physical and Chemical Hydrodynamics, A. V. Luikov Heat and Mass Transfer Institute of the National Academy of Sciences of Belarus (15, P. Brovka Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: serge0788@hmti.ac.by

For citation

Popov I.A., Shchelchkov A.V., Skrypnik A.N., Zubkov N.N., Zhukova Yu.V., Chorny A.D., Sverchikov S.A. Numerical and experimental study of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning by deforming cutting. *Vestsi Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 82–89.

В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева, В. Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН И ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ОЛОВА

Методами квантово-механического моделирования установлены зонная структура и оптические свойства объема и одного мономолекулярного слоя дихалькогенидов олова – SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2 . Показано, что первые два соединения в объеме являются непрямозонными полупроводниками, в то время как SnTe_2 – бесщелевой полупроводник. При увеличении порядкового номера атома халькогена рассмотренные соединения демонстрируют увеличение постоянных решетки и межатомного расстояния, а также уменьшение ширины запрещенной зоны с 2,4 до 0 эВ. При переходе от объемного материала к одному мономолекулярному слою структурные параметры практически не изменяются; наблюдается пропорциональный рост величины энергетического зазора, в результате чего SnTe_2 становится узкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 0,17 эВ. Из исследованных соединений наиболее интересным с точки зрения практического использования является диселенид олова SnSe_2 благодаря подходящей для применения в фотовольтаике ширине запрещенной зоны (1,0–1,5 эВ) и значениям коэффициента поглощения вблизи края собственного поглощения более 10^5 см^{-1} . Также большой интерес представляют тройные растворы замещения, варьирование химического состава которых позволяет изменять в широком диапазоне электронную структуру и оптические свойства материалов.

Ключевые слова: дихалькогениды олова, зонная структура, ширина запрещенной зоны, коэффициент оптического поглощения, солнечный элемент.

V. L. Shaposhnikov, A. V. Krivosheeva, V. E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

COMPUTER SIMULATION OF ENERGETIC BANDS AND OPTICAL PARAMETERS OF TIN DICHALCOGENIDES

The band structure and optical properties of the bulk and one monolayer of SnS_2 , SnSe_2 , and SnTe_2 were established by means of *ab initio* theoretical modeling. The first two bulk compounds were found to be indirect gap semiconductors, while SnTe_2 behaves like a gapless semiconductor. As the atomic number of chalcogen is increased, the compounds considered show an increase in lattice constants and interatomic distances, as well as a decrease in the band gap from 2.4 to 0 eV. Upon transition from the bulk material to a single monolayer, the structural parameters remain practically unchanged. There is a proportional increase in the energy gap, whereby SnTe_2 becomes a narrow-gap semiconductor with a band gap of 0.17 eV. The most interesting compound according to a practical use is tin diselenide SnSe_2 due to the band gap (1.0–1.5 eV) and the absorption coefficient near the absorption edge more than 10^5 cm^{-1} that are appropriate for photovoltaics. Ternary tin dichalcogenides are also of great interest as the variation of the chemical composition of the latter allows modifying the electronic structure and the optical properties in a wide range.

Keywords: tin dichalcogenides, band structure, band gap, absorption coefficient, solar cell.

Введение. В последнее время получение, преобразование и хранение энергии стало одним из наиболее динамично развивающихся направлений современной электроники. Для портативных и автономных приборов необходимо искать новые решения по энергоснабжению посредством эффективных фотоэлектрических и термоэлектрических преобразователей [1]. Тонкопленочные солнечные батареи могли бы предложить новые возможности для усовершенствования указанных приборов, в связи с чем определенный интерес представляют соединения олова, такие как SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2 , поскольку они могут быть синтезированы с использованием серийной технологии, такой как атомно-слоевое или плазмохимическое газофазное осаждение. Химические элементы, входящие в состав указанных соединений, характеризуются невысокой стоимостью, широким распространением в природе (сера и олово), а также малой токсичностью компонентов и технологических процессов их производства.

Сульфид олова существует в различных фазах и стехиометриях [2]. Наиболее исследованным является моносульфид SnS , однако также известен дисульфид SnS_2 с шириной запрещенной зоны более 2 эВ. Недавно методом нанесения на стеклянные подложки с помощью газотранспортного осаждения был получен поликристаллический SnS_2 [3]. Особенностью соединений SnX_2 является слоистая структура, аналогичная структуре хорошо известных дихалькогенидов переходных металлов, примером которых может служить MoS_2 . Уже имеются сведения об использовании SnS_2 для литиевых батарей, полевых транзисторов и расщепления воды [4, 5]. Благодаря ширине запрещенной зоны 2,2–2,4 эВ, SnS_2 также рассматривается в качестве кандидата на роль фотокатализатора, чувствительного в видимой области спектра [6, 7]. Было показано, что SnS_2 мономолекулярной толщины обладает улучшенными фотокаталитическими свойствами по сравнению с его трехмерным аналогом. Авторами [8] были синтезированы слои SnS_2 толщиной в три атома, в которых эффективность преобразования видимого света составила 38,7 %, что значительно выше, чем у объемного SnS_2 [8]. В работе [9] описаны наноразмерные листы SnS_2 , у которых фотокаталитическая активность была значительно повышена за счет двумерности структуры листа. В отличие от дисульфида, сведений о двух других соединениях олова (SnSe_2 и SnTe_2) значительно меньше. Кроме того, имеются данные о формировании твердых растворов замещения вида $\text{SnS}_x\text{Se}_{2-x}$ [10]. Таким образом, исследование свойств дихалькогенидов олова является актуальным и представляет практический интерес.

В настоящей работе с помощью первопринципного метода определены электронная структура и оптические свойства соединений SnX_2 (SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2) как в объемном состоянии, так и в слоях мономолекулярной толщины с целью выявления особенностей и закономерностей изменения их характеристик для возможного применения в фотовольтаике.

Методика исследования. Дихалькогениды олова SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) кристаллизуются в гексагональной кристаллической решетке (пространственная группа $P3m1$) [2]. В элементарной ячейке содержатся три атома, а кристаллическая решетка напоминает слоистую структуру, характерную для дихалькогенидов тугоплавких металлов вида MoS_2 , к которым в последнее время наблюдается повышенный интерес благодаря их электронным и оптическим свойствам. Плоскость из атомов олова расположена между двумя плоскостями из атомов халькогена. Отличие данной кристаллической структуры от MoS_2 заключается в том, что если в элементарной ячейке последнего содержится два мономолекулярных слоя S-Mo-S, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса, то элементарная ячейка SnX_2 состоит только из одного слоя X-Sn-X, в пределах которого, в отличие от мономолекулярного слоя MoS_2 , атомы халькогена смещены друг относительно друга. Такие свободностоящие слои отличаются стабильностью и могут быть получены в результате механического или химического расщепления, как было показано для SnS_2 [8, 11]. Влияние подложки на двумерные структуры в данной статье не рассматривается.

Атомарную структуру мономолекулярных слоев SnX_2 моделировали путем ограничения объема кристалла плоскостью, перпендикулярной направлению (0001). Для устранения взаимодействия между мономолекулярными слоями использовали разделительный слой вакуума толщиной 17 Å. Позиции всех атомов подвергали релаксации. Полную оптимизацию кристаллической структуры осуществляли в рамках теории функционала плотности, используя первопринципный метод псевдопотенциала (код VASP) с базисом на плоских волнах [12]. Обменно-корреляционное взаимодействие описывали в рамках обобщенного градиентного приближения (ОГП) [13]. Энергия отсечки (параметр ENCUT) была выбрана равной 370 эВ, так как дальнейшее увеличение этого параметра не приводит к существенному изменению полной энергии системы. Интегрирование по зоне Бриллюэна выполняли линейным методом тетраэдров.

Моделирование электронных энергетических зон и оптических спектров исследуемых соединений проводили методом линейаризованных присоединенных плоских волн (пакет WIEN2K [14]) на основе оптимизированных ранее с помощью пакета VASP параметров решеток и атомных позиций. Для вычисления дипольных матричных элементов использовали сетку из 470 к-точек. Межзонные вклады в мнимую часть диэлектрической функции (ϵ_2) вычисляли в приближении хаотических фаз. Эффектами локального поля пренебрегали. Для корректного описания обменно-корреляционного взаимодействия и получения более точных величин энергетических зазоров

использовали модифицированный обменный потенциал Беке – Джонсона (mBJ) [15]. В дальнейшем все зонные спектры и оптические свойства получены с применением mBJ-потенциала.

Результаты и их обсуждение. В ходе полной оптимизации кристаллической структуры были установлены постоянные решеток и межатомные расстояния исследуемых соединений, которые показали хорошую корреляцию с имеющимися экспериментальными данными для объемных материалов. В ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 первое соединение характеризуется наименьшими величинами постоянных решеток a и c , а также межатомного расстояния Sn-S, в то время как SnTe_2 – наибольшими. При переходе от объемного материала к мономолекулярному слою постоянные решеток и межатомное расстояние Sn-X практически не изменяются. Аналогичная тенденция наблюдалась и для MoS_2 [16].

Рассчитанные электронные энергетические зонные диаграммы исследуемых соединений представлены на рис. 1.

Очевидно, что в обоих случаях SnS_2 и SnSe_2 проявляют полупроводниковые свойства, в то время как соединение SnTe_2 в объеме является бесщелевым полупроводником, поскольку значительная часть нижней зоны проводимости в окрестности точки L пересекает уровень Ферми. При переходе к мономолекулярному слою в SnTe_2 появляется энергетический зазор величиной 0,17 эВ, что превращает данное соединение в узкозонный полупроводник.

Качественно зонные спектры трех соединений в ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 подобны и характеризуются схожими зонными спектрами вблизи уровня Ферми как в валентной зоне, так и в зоне проводимости. В объемном состоянии SnS_2 и SnSe_2 являются непрямозонными полупроводниками. В их электронных спектрах имеются по два максимума валентной зоны (МВЗ) (в параллельных направлениях Γ –M и A–L) и два минимума зоны проводимости (МЗП) (в точках M и L), значения энергии между которыми различаются всего на десятки миллиэлектронвольт. Полученные величины энергетического зазора хорошо согласуются с экспериментальными данными, в соответствии с которыми ширина запрещенной зоны (E_g) SnS_2 лежит в пределах от 1,9 до 2,2 эВ. К особенностям зонной структуры можно отнести и нижнюю зону проводимости,

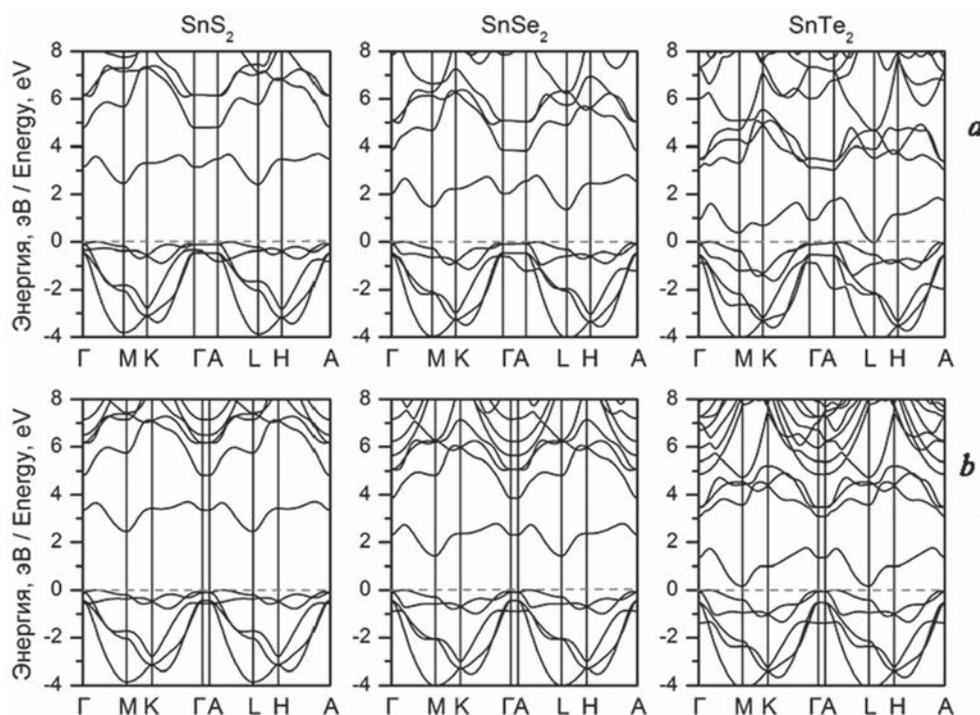


Рис. 1. Энергетическая структура электронных зон в SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) вдоль направлений высокой симметрии гексагональной зоны Бриллюэна: a – в объемных материалах; b – в слоях мономолекулярной толщины.

Нуль на шкале энергий соответствует уровню Ферми

Fig. 1. Energy band structures of SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) compounds in some directions of the hexagonal Brillouin zone: a – in bulk materials; b – in one monolayer compounds. Zero on the energy scale corresponds to the Fermi energy

отделенную от остальной зоны проводимости зазором порядка 1,0–1,2 эВ (см. рис. 1). В случае объемных материалов при увеличении порядкового номера халькогена наблюдается понижение величины энергетического зазора в ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 от 2,42 эВ для SnS_2 до 0 эВ для SnTe_2 .

При переходе от объема к мономолекулярному слою качественно зонная картина практически не изменяется. Наблюдается незначительное увеличение ширины запрещенной зоны, приводящее к тому, что E_g для мономолекулярного слоя SnS_2 составляет 2,45 эВ, а для SnSe_2 – 1,42 эВ. Эта тенденция повторяет поведение дихалькогенидов тугоплавких металлов типа MoS_2 , у которых E_g для мономолекулярного слоя также оказывается немного больше, чем в объемном материале. Это можно объяснить тем, что по мере уменьшения количества слоев расщепление зон, которые ограничивают запрещенную зону, становится менее выраженным, при этом МВЗ и МЗП смещаются соответственно вниз и вверх по энергии. Кроме того, с уменьшением количества слоев взаимодействие между ними также уменьшается, что приводит к меньшей дисперсии зон и большей ширине запрещенной зоны. Отличие от MoS_2 заключается в том, что в последнем при переходе к мономолекулярному слою происходит трансформация непрямозонного полупроводника в прямозонный [16], чего не наблюдается в ряду рассмотренных соединений SnX_2 . В них схожесть зонных структур для объемного соединения и мономолекулярного слоя можно объяснить подобным атомным окружением, а также тем, что элементарная ячейка объемного MoS_2 содержит два смещенных друг относительно друга слоя, в то время как элементарная ячейка SnX_2 – только один слой.

Анализ полных и парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС), представленных на рис. 2, и орбитального состава волновых функций на примере SnS_2 показывает, что валентную зону в диапазоне от –7 до 0 эВ можно разделить на несколько характерных областей. Низколежащие энергетические уровни, расположенные в диапазоне от –7 до –4 эВ, практически полностью сформированы Sn-*s* электронными состояниями. Вторая область (от –4 до –1 эВ), отделенная от первой зазором в 0,1 эВ, обусловлена состояниями Sn-*p* и S-*p*. Третья область (от –1 до 0 эВ) характеризуется преимущественно состояниями S-*p* с небольшим вкладом состояний Sn-*d*.

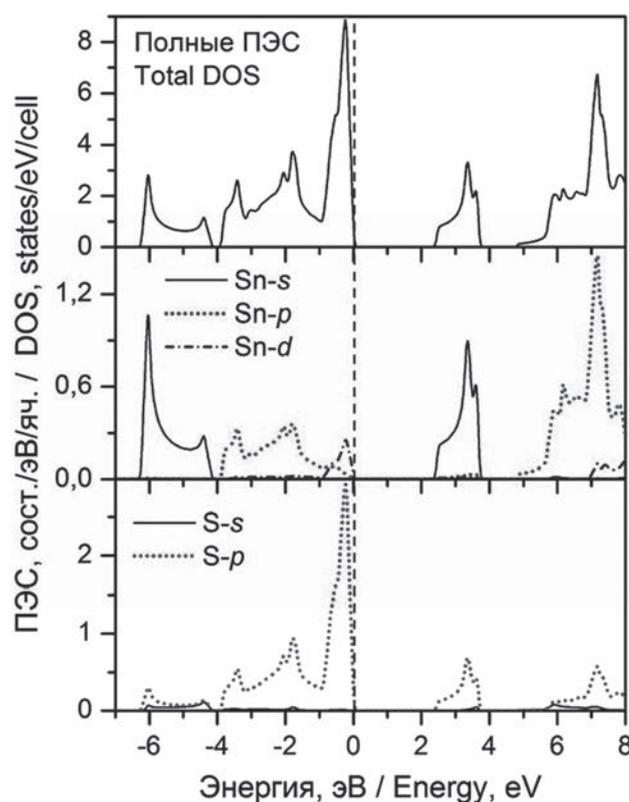


Рис. 2. Полные и парциальные ПЭС объемного SnS_2 . Нуль на шкале энергий соответствует уровню Ферми
 Fig. 2. Total and projected densities of the SnS_2 bulk states. Zero on the energy scale corresponds to the Fermi energy

Нижняя отдельно расположенная зона проводимости вблизи уровня Ферми сформирована в основном за счет состояний Sn-*s* и S-*p*, а последующие уровни зоны проводимости обусловлены в основном *p*-состояниями атомов олова. Аналогичные спектры ПЭС были получены и для двух других соединений. При переходе от объемного материала к мономолекулярному слою характер электронных состояний и орбитальный состав волновых функций не претерпевают существенных изменений.

Анализ оптических свойств дихалькогенидов олова проводили на основании расчетов комплексной диэлектрической функции. Спектральные зависимости мнимой части диэлектрической функции (ϵ_2) для объемных и мономолекулярных структур дихалькогенида олова для двух основных направлений поляризации света представлены на рис. 3.

Полученные спектры характеризуются анизотропией для направлений поляризации света $E||a$ и $E||c$ у всех рассмотренных соединений и типов структур. Однако, несмотря на то, что ширина запрещенной зоны объемного SnTe₂ равна нулю, его спектральная зависимость ϵ_2 схожа со спектрами диэлектрической функции соединений SnS₂ и SnSe₂, которые имеют четко выраженный полупроводниковый характер электронных зон. Это можно объяснить тем, что при моделировании спектров диэлектрической функции учитываются только прямые межзонные переходы, величины которых для SnTe₂ во всех точках зоны Бриллюэна больше нуля.

Все спектральные зависимости ϵ_2 характеризуются отсутствием резкого роста кривой при энергиях, соответствующих ширине запрещенной зоны или первому прямому переходу. В частности, для объемного SnS₂ в зависимости от направления поляризации света энергия первого пика составляет 4,53 и 4,59 эВ. На зонной структуре это соответствует переходам между верхней валентной зоной и второй зоной проводимости в направлении Г–А, перпендикулярном плоскости пленки (0001), что можно объяснить орбитальным составом волновых функций. Поскольку нижняя зона проводимости образована состояниями Sn-*s*, а в верхней валентной зоне присут-

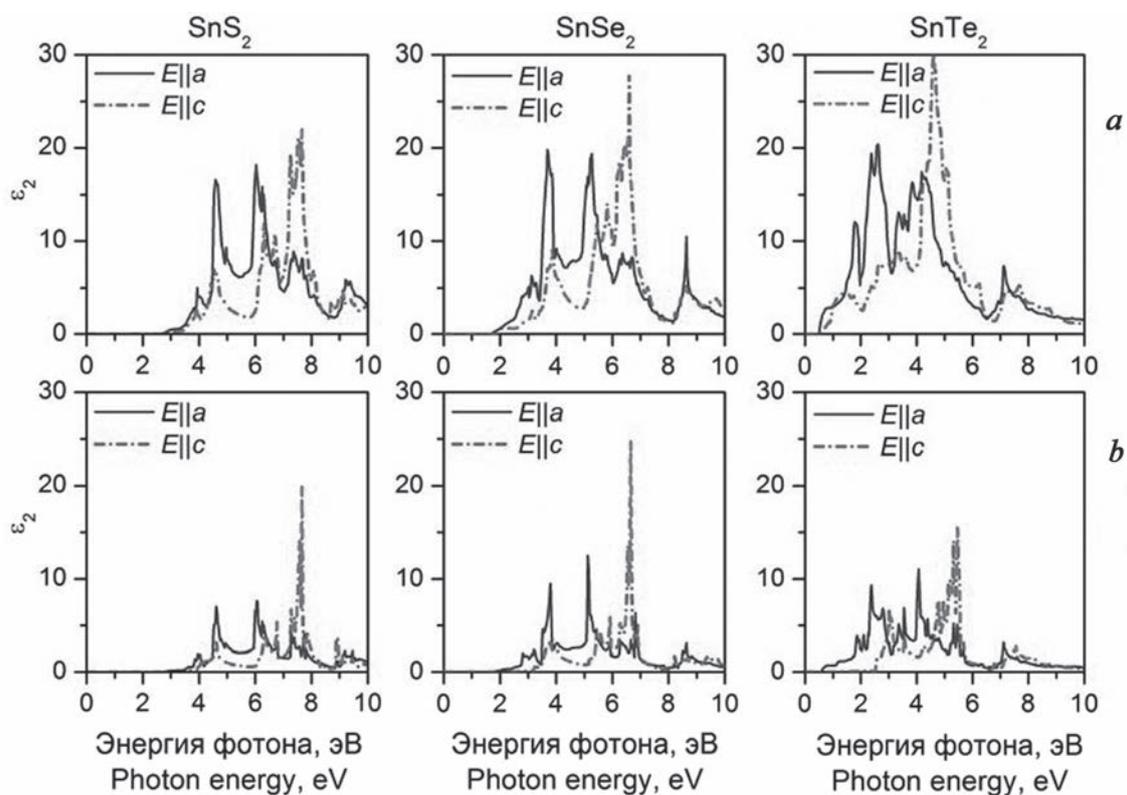


Рис. 3. Мнимая (ϵ_2) часть диэлектрической функции для объемных (a) и мономолекулярных (b) соединений SnX₂ (X = S, Se, Te) при различных направлениях поляризации света

Fig. 3. Imaginary part (ϵ_2) of the dielectric function of bulk (a) and one monolayer (b) of SnX₂ compounds (X = S, Se, Te) in different directions of light polarization

ствуют состояния Sn- d , переходы между ними являются запрещенными, так же как и переходы между состояниями S- p , формирующими обе зоны. Таким образом, можно заключить, что дихалькогениды олова в объемном состоянии не будут эффективны для создания светоизлучающих элементов.

Спектры ϵ_2 для мономолекулярных слоев SnS₂ и SnSe₂ аналогичны соответствующим спектрам для объемных соединений. Более того, несмотря на некоторое увеличение ширины запрещенной зоны, в SnS₂ и SnSe₂ положение основных пиков у мономолекулярного слоя практически совпадает с положением пиков у объемных соединений. Для SnTe₂ имеет место некоторое смещение пиков. Анализ статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 для объемных дихалькогенидов олова показывает понижение ее значений в ряду SnS₂–SnSe₂–SnTe₂ от 13,5 для SnTe₂ до 5 для SnS₂. В случае мономолекулярных слоев наблюдается аналогичная ситуация, однако численные значения оказываются примерно в два раза меньше. Кроме того, если для SnS₂ значения ϵ_0 для двух направлений поляризации света практически равны, то в случае SnTe₂ они существенно различаются, при этом у объемных соединений это различие больше, чем у мономолекулярного слоя.

Для оценки применимости исследуемых материалов в солнечных элементах был проанализирован коэффициент оптического поглощения. На рис. 4 представлены спектральные зависимости коэффициента поглощения света дихалькогенидами олова, усредненные по двум направлениям поляризации света, в сравнении с теоретически рассчитанным спектром для GaAs.

Очевидно, что поскольку объемный дисульфид олова SnS₂ характеризуется значительной шириной запрещенной зоны (2,42 эВ), он не эффективен для использования в солнечных элементах, однако может найти применение в качестве материала, обладающего фотокаталитической активностью под действием видимого излучения. В то же время у диселенида олова SnSe₂ ширина запрещенной зоны составляет порядка 1,50 эВ, что привлекательно для его применения в солнечной энергетике. Следует также отметить, что все три соединения как в виде мономолекулярного слоя, так и в объемном состоянии имеют значения коэффициента оптического поглощения вблизи края собственного поглощения более 10^5 см^{-1} , что сравнимо со значениями коэффициента поглощения для арсенида галлия. Более того, сера, селен и теллур принадлежат одной группе периодической таблицы элементов, а сами материалы являются изоструктурными. Помимо этого, имеются экспериментальные данные о формировании твердых растворов замещения SnS_{*x*}Se_{*2-x*} при варьировании концентрации атомов халькогена [10]. Таким образом, на их основе возможно получать тройные соединения с заданными электронными и оптическими свойствами, в частности с требуемой шириной запрещенной зоны. Все это делает дихалькогениды олова, не содержащие

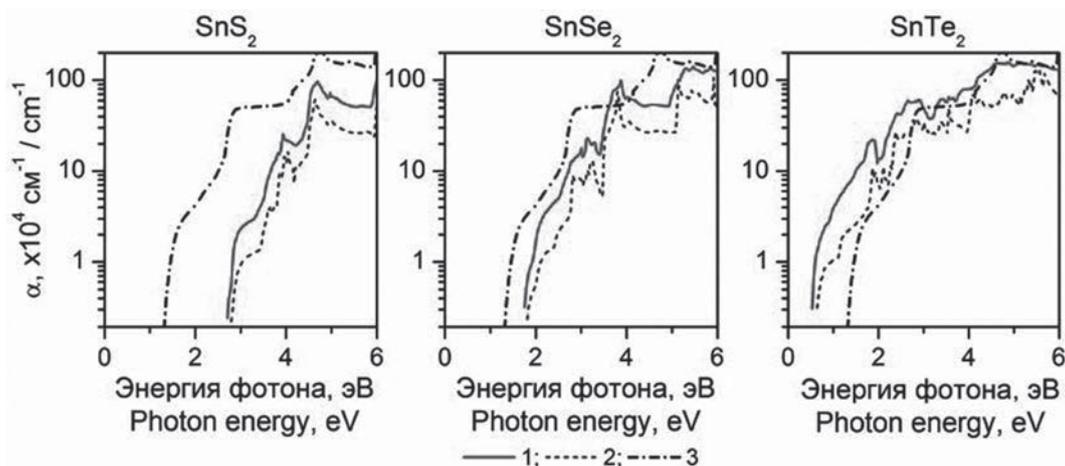


Рис. 4. Зависимость усредненного коэффициента оптического поглощения света (α) объемными (кривая 1) и монослойными (кривая 2) дихалькогенидами олова от энергии фотонов в сравнении с GaAs (кривая 3)

Fig. 4. Averaged absorption coefficient (α) of bulk (curve 1) and one monolayer (curve 2) tin dichalcogenides versus the photon energy as compared to GaAs (curve 3)

дорогостоящих и токсичных компонентов, привлекательными для создания многослойных солнечных элементов и фотокатализаторов.

Заклучение. Путем теоретического моделирования определены электронная структура и оптические свойства объемных дихалькогенидов олова и их изменение при уменьшении толщины до одного мономолекулярного слоя. В то время как SnS_2 и SnSe_2 являются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны 2,42 и 1,50 эВ соответственно, SnTe_2 в объемном состоянии является бесщелевым полупроводником, а в виде мономолекулярного слоя – узкозонным полупроводником. Такое сочетание свойств в зависимости от состава исследуемых материалов и их размерности открывает важные перспективы их практического использования в солнечной энергетике и для фотокатализа.

Благодарности

Работа выполнена в рамках задания 2.1.02 Государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (2016–2020 гг.).

Acknowledgments

This work was supported by the State Research Program of the Republic of Belarus “Photonics, Opto- and Microelectronics”, grant 2.1.02 (2016–2020).

Список использованных источников

1. High-efficient low-cost photovoltaics: recent developments / ed. V. Petrova-Koch, R. Hezel, A. Goetzberger. Springer-Verlag: Berlin-Heidelberg. – 2008. – Vol. 140. – 228 p.
2. Madelung, O. Semiconductors: data handbook / O. Madelung. – Springer Berlin Heidelberg, 2004. – 691 p.
3. Thermoelectrics with earth abundant elements: low thermal conductivity and high thermopower in doped SnS / Q. Tan [et al.] // *J. Mater. Chem. A*. – 2014. – Vol. 2. – P. 17302–17306.
4. Monodisperse SnS_2 nanosheets for high-performance photocatalytic hydrogen generation / J. Yu [et al.] // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2014. – Vol. 6. – P. 22370–22377.
5. Interconnected tin disulfide nanosheets grown on graphene for Li-ion storage and photocatalytic applications / P. Chen [et al.] // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2013. – Vol. 5, N 22. – P. 12073–12082.
6. Controlled synthesis and possible formation mechanism of leaf-shaped SnS_2 nanocrystals / D. Ma [et al.] // *Mater. Chem. Phys.* – 2008. – Vol. 111, N 2. – P. 391–395.
7. Novel synthesis and high visible light photocatalytic activity of SnS_2 nanoflakes from $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and S powders / Y. C. Zhang [et al.] // *Appl. Catal. B*. – 2010. – Vol. 95, N 1. – P. 153–159.
8. Freestanding tin disulfide single-layers realizing efficient visible-light water splitting / Y. Sun [et al.] // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2012. – Vol. 51, N 35. – P. 8727–8731.
9. Ultrathin SnS_2 nanosheets with exposed {0 0 1} facets and enhanced photocatalytic properties / R. Wei [et al.] // *Acta Mater.* – 2014. – Vol. 66. – P. 163–171.
10. Field effect transistors with layered two-dimensional $\text{SnS}_{2-x}\text{Se}_x$ conduction channels: effects of selenium substitution / T. Pan [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103, N 9. – P. 093108 (5 pp).
11. High-performance top-gated monolayer SnS_2 field-effect transistors and their integrated logic circuits / H. S. Song [et al.] // *Nanoscale*. – 2013. – Vol. 5, N 20. – P. 9666–9670.
12. Kresse, G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 54, N 16. – P. 11169–11186.
13. Perdew, J. P. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, N 18. – P. 3865–3868.
14. WIEN2k, An augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties / P. Blaha [et al.]. – Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001. – 258 p.
15. Tran, F. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential / F. Tran, P. Blaha // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – Vol. 102, N 22. – P. 226401 (4 pp).
16. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS_2 / A. V. Krivosheeva [et al.] // *J. Semiconductors*. – 2015. – Vol. 36, N 12. – P. 122002 (6 pp).

References

1. Petrova-Koch V., Hezel R., Goetzberger A. (eds.) *High-efficient low-cost photovoltaics: recent developments*. Berlin-Heidelberg, Springer-Verlag, 2008, vol. 140. 228 p.
2. Madelung O. *Semiconductors: data handbook*. Berlin-Heidelberg, Springer, 2004. 691 p.
3. Tan Q., Zhao L.-D., Li J.-F., Wu C.-F., Wei T.-R., Xing Z.-B., Kanatzidis M. G. Thermoelectrics with earth abundant elements: low thermal conductivity and high thermopower in doped SnS . *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, vol. 2, no. 41, pp. 17302–17306. doi: 10.1039/C4TA04462B.
4. Yu J., Xu C.Y., Ma F.X., Hu S.P., Zhang Y.W., Zhen L. Monodisperse SnS_2 nanosheets for high-performance photocatalytic hydrogen generation. *ACS applied materials & interfaces*, 2014, vol. 6, no. 24, pp. 22370–22377. doi: 10.1021/am506396z.

5. Chen P. Su Y., Liu H., Wang Y. Interconnected tin disulfide nanosheets grown on graphene for Li-ion storage and photocatalytic applications. *ACS applied materials & interfaces*, 2013, vol. 5, no. 22, pp. 12073–12082. doi: 10.1021/am403905x.
6. Ma D., Zhou H., Zhang J., Qian Y. Controlled synthesis and possible formation mechanism of leaf-shaped SnS₂ nanocrystals. *Materials Chemistry and Physics*, 2008, vol. 111, no. 2, pp. 391–395. doi: 10.1016/j.matchemphys.2008.04.035.
7. Zhang Y.C., Du Z.N., Li S.Y., Zhang M. Novel synthesis and high visible light photocatalytic activity of SnS₂ nanoflakes from SnCl₂·2H₂O and S powders. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2010, vol. 95, no. 1, pp. 153–159. doi: 10.1016/j.apcatb.2009.12.022.
8. Sun Y., Cheng H., Gao S., Sun Z., Liu Q., Liu Q., Lei F., Yao T., He J., Wei S., Xie Y. Freestanding tin disulfide single-layers realizing efficient visible-light water splitting. *Angewandte Chemie International Edition*, 2012, vol. 51, no. 35, pp. 8727–8731. doi: 10.1002/anie.201204675.
9. Wei R., Hu J., Zhou T., Zhou X., Liu J., Li J. Ultrathin SnS₂ nanosheets with exposed {0 0 1} facets and enhanced photocatalytic properties. *Acta Materialia*, 2014, vol. 66, pp. 163–171. doi: 10.1016/j.actamat.2013.11.076.
10. Pan T., De D., Manongdo J., Guloy A., Hadjiev V., Lin Y., Peng H. Field effect transistors with layered two-dimensional SnS_{2-x}Se_x conduction channels: effects of selenium substitution. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, no 9, p. 093108. doi: 10.1063/1.4819072.
11. Song H.S., Li S.L., Gao L., Xu Y., Ueno K., Tang J., Cheng Y B. High-performance top-gated monolayer SnS₂ field-effect transistors and their integrated logic circuits. *Nanoscale*, 2013, vol. 5, no. 20, pp. 9666–9670. doi: 10.1039/c3nr01899g.
12. Kresse G., Furthmüller J. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical review B*, 1996, vol. 54, no. 16, pp. 11169–11186. doi: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. doi:10.1103/PhysRevLett.77.3865.
14. Blaha P., Ma K., Madsen G. K. H., Kvasnicka D., Luitz J. *WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties*. Wien, Vienna University of Technology, 2001. 258 p.
15. Tran F., Blaha P. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. *Physical review letters*, 2009, vol. 102, no 22, p. 226401. doi: 10.1103/PhysRevLett.102.226401.
16. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E., Lazzari J.-L., Waileong Ch., Gusakova J., Tay B.K. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS₂. *Journal of Semiconductors*, 2015, vol. 36, no. 12, p. 122002. doi: 10.1088/1674-4926/36/12/122002.

Информация об авторах

Шапошников Виктор Львович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: victor.shaposhnikov@gmail.com

Кривошеева Анна Владимировна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: anna@nano.bsuir.edu.by

Борисенко Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой микро- и нанoeлектроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: borisenko@bsuir.by

Для цитирования

Шапошников, В. Л. Компьютерное моделирование энергетических зон и оптических параметров дихалькогенидов олова / В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева, В. Е. Борисенко // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 90–97.

Information about the authors

Shaposhnikov Victor L'vovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: victor.shaposhnikov@gmail.com

Krivosheeva Anna Vladimirovna – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: anna@nano.bsuir.edu.by

Borisenko Victor Evgenievich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: borisenko@bsuir.by

For citation

Shaposhnikov V.L., Krivosheeva A.V., Borisenko V.E. Computer simulation of energetic bands and optical parameters of tin dichalcogenides. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 90–97. (in Russian)

А. Д. Замковец¹, А. Н. Понявина¹, Л. В. Баран²

¹Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь

²Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

ПЛАЗМОННЫЙ РЕЗОНАНС В ПЛАНАРНЫХ СЛОИСТЫХ НАНОСТРУКТУРАХ СЕРЕБРО-ФТАЛОЦИАНИН НИКЕЛЯ

Изучены спектральные свойства тонких пленок фталоцианина никеля (NiPc) и серебра (Ag), полученных термическим осаждением в вакууме на стеклянные и кварцевые подложки (П), а также планарных гибридных наноструктур, в которых нанометровые пленки органического полупроводника контактируют с островковыми структурами серебра. Исследованы две конфигурации планарных гибридных наноструктур – монослой наночастиц серебра под пленкой фталоцианина никеля (П/Ag/NiPc) и монослой наночастиц серебра над пленкой фталоцианина никеля (П/NiPc/Ag). Толщина пленок NiPc изменялась от 10 до 30 нм. Поверхностная плотность металла составляла $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ г/см². С помощью сканирующего зондового микроскопа Solver P47-PRO в полуконтактном режиме изучена структура исследуемых наноструктур. Оптические спектры записывались на спектрофотометре Cary 500. Установлено, что присутствие наночастиц Ag наиболее значительно усиливает эффективное поглощение пленки NiPc толщиной ~ 10 нм в области электронных полос поглощения $\lambda \sim 600\text{--}700$ нм. Данный эффект проявляется за счет способности плазмонных наночастиц усиливать локальное поле вблизи своей поверхности на расстояниях, сравнимых с размерами наночастиц. Количественные оценки показали, что наличие наночастиц Ag приводит к увеличению оптической плотности на длине волны $\lambda = 625$ нм для наноструктур П/Ag/NiPc и П/NiPc/Ag соответственно на 25 и 33 %. Предполагается, что зависимость величины эффективного поглощения пленки NiPc от конструкции гибридной системы может быть связана с особенностями формирования наноструктур в процессе термического осаждения.

Ключевые слова: наноструктура, плазмонный резонанс, органический полупроводник, полоса поглощения.

A. D. Zamkovets¹, A. N. Ponyavina¹, L. V. Baran²

¹B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

²Belarusian State University, Minsk, Belarus

PLASMON RESONANCE IN THE PLANAR LAYERED SILVER-NICKEL PHTHALOCYANINE NANOSTRUCTURES

Spectral properties of nickel phthalocyanine (NiPc) and silver (Ag) thin films, as well as of planar hybrid nanostructures composed of organic semiconductor nanometer films contacting with silver island structures were studied. All nanostructures were fabricated by thermal vacuum evaporation on glass and quartz substrates (S). Two configurations of planar hybrid nanostructures were investigated, in which the silver nanoparticle monolayer was placed under the NiPc film (S/Ag/NiPc) and over the NiPc film (S/NiPc/Ag). The NiPc film thickness was changed from 10 to 30 nm. The silver surface density was about $2 \cdot 10^{-6}$ g/cm². The surface structure of films was studied with the use of a scanning probe microscope “Solver P47 - PRO” in the semi-contact regime. Optical spectra were recorded by a spectrophotometer “Cary 500”. The most significant increase in the organic film absorption in a presence of Ag nanoparticles was observed for the NiPc film thickness of 10 nm over the spectral range of electronic absorption bands $\lambda \sim 600\text{--}700$ nm. The effect is due to the local field strengthening near the plasmonic nanoparticles surface for distances compared with nanoparticle sizes. Quantitative regards showed that for the nanostructures of S/Ag/NiPc and S/NiPc/Ag the existence of Ag nanoparticles leads to an increase in the optical density at the wavelength $\lambda = 625$ nm at 25 and 33 %, respectively. We suppose that the dependence of the NiPc film effective absorption on the hybrid nanostructure configuration may be related to the features of the nanostructure formation in the process of thermal evaporation.

Keywords: nanostructure, plasmon resonance, organic semiconductor, absorption band.

Введение. Важными элементами современной электронной техники становятся органические полупроводниковые материалы. Среди них одно из центральных мест занимают фталоцианины [1], характеризующиеся наличием делокализованных электронных состояний в цепях со-

пряжения, а также обладающие достаточно высокой устойчивостью к повышенным температурам и агрессивным средам. Эти свойства делают указанные материалы привлекательными для практического применения. Фталоцианины представляют интерес для создания светоизлучающих устройств [2] и фотовольтаических ячеек [3], обладают высокой чувствительностью к газам и могут использоваться как активные элементы сенсорных устройств [4]. Модифицируя данные органические материалы, можно изменять их проводимость, а также регулировать ширину запрещенной зоны. Такая уникальная возможность представляется чрезвычайно полезной для создания на их основе нового типа оптоэлектронных устройств различного назначения.

Перспективным является использование в сочетании с фталоцианинами наночастиц благородных металлов, характеризующихся наличием в видимом диапазоне полос поверхностного плазмонного резонансного поглощения (ППРП) и обладающих способностью усиливать локальные поля вблизи своей поверхности [5]. Такие объекты интенсивно исследуются в настоящее время. Их уникальные возможности уже находят применение в биологии и медицине, оптоэлектронике и информатике [6]. Плазмонные и плазмонно-фотонные структуры позволяют объединить в одном устройстве миниатюрность, присущую электронным схемам, и быстродействие, свойственное фотонным системам. Включение наночастиц с плазмонными свойствами в состав функциональных элементов и гибридных материалов, содержащих как неорганические, так и органические компоненты, открывает перспективы создания приборов и устройств нового поколения, параметры которых недостижимы для традиционных планарных технологий. Одной из важных задач в этой области является изучение закономерностей модификации спектральных характеристик гибридных систем различной топологии при световых воздействиях. В настоящей работе приводятся результаты исследования влияния наночастиц серебра на спектральные характеристики наноструктур серебро-фталоцианин никеля (Ag/NiPc).

Методика эксперимента. Наноструктуры изготавливались на вакуумной установке ВУ-1А последовательным термическим испарением компонентов на подложки (П) из оптического стекла и кварца. Температуры подложек были комнатными. Давление остаточных газов составляло $2 \cdot 10^{-3}$ Па. Контроль толщин осаждаемых слоев производился кварцевым датчиком. Оптические спектры записывались на спектрофотометре Cary 500. Структура пленок изучалась с помощью сканирующего зондового микроскопа Solver P47-PRO в полуконтактном режиме.

Обсуждение полученных результатов. Нами изготовлены и исследованы тонкие пленки NiPc и Ag, а также планарные гибридные наноструктуры П/Ag/NiPc и П/NiPc/Ag, в которых нанометровые пленки органического полупроводника контактируют с островковыми структурами серебра.

На рис. 1, *a* представлено АСМ-изображение сформированной на стеклянной подложке пленки NiPc толщиной ~ 10 нм. Из рисунка видно, что пленка состоит из нанокристаллитов с латеральными размерами порядка 20–30 нм. Средняя шероховатость поверхности пленки составляет 2–3 нм. На рис. 1, *b* приведено АСМ-изображение поверхности двухслойной наноструктуры П/NiPc/Ag, сформированной на стеклянной подложке. Обращает внимание то обстоятельство, что система П/NiPc/Ag отличается от пленки NiPc значительно большими размерами нанокристаллитов по вертикали (14–16 нм). Многие наночастицы имеют форму вытянутых пирамид (см. 3D-изображение поверхности этой наноструктуры на рис. 1, *c*). Анализируя возможные причины существенного увеличения неоднородности рельефа поверхности для системы П/NiPc/Ag по сравнению с пленкой NiPc, следует учитывать тот факт, что фталоцианины представляют собой молекулярные кристаллы [7], характеризующиеся наличием относительно слабых вандер-ваальсовых межмолекулярных взаимодействий. Для тонкой пленки NiPc (порядка 10 нм) на стеклянной подложке при комнатных температурах, как правило, формируется α -форма органического полупроводника [8]. Это косвенно подтверждается относительно небольшими размерами зерен на АСМ-снимке (менее 50 нм). Для β -фазы кристаллиты обычно являются более крупными [9]. По сравнению с β -формой α -модификация фталоцианинов характеризуется более слабыми межмолекулярными связями. Возможно, часть этих связей разрушается при термическом осаждении атомов Ag на поверхность NiPc, и наблюдается явление, подобное свеллингу (разбуханию) поверхности, приводящее к увеличению неоднородности рельефа.

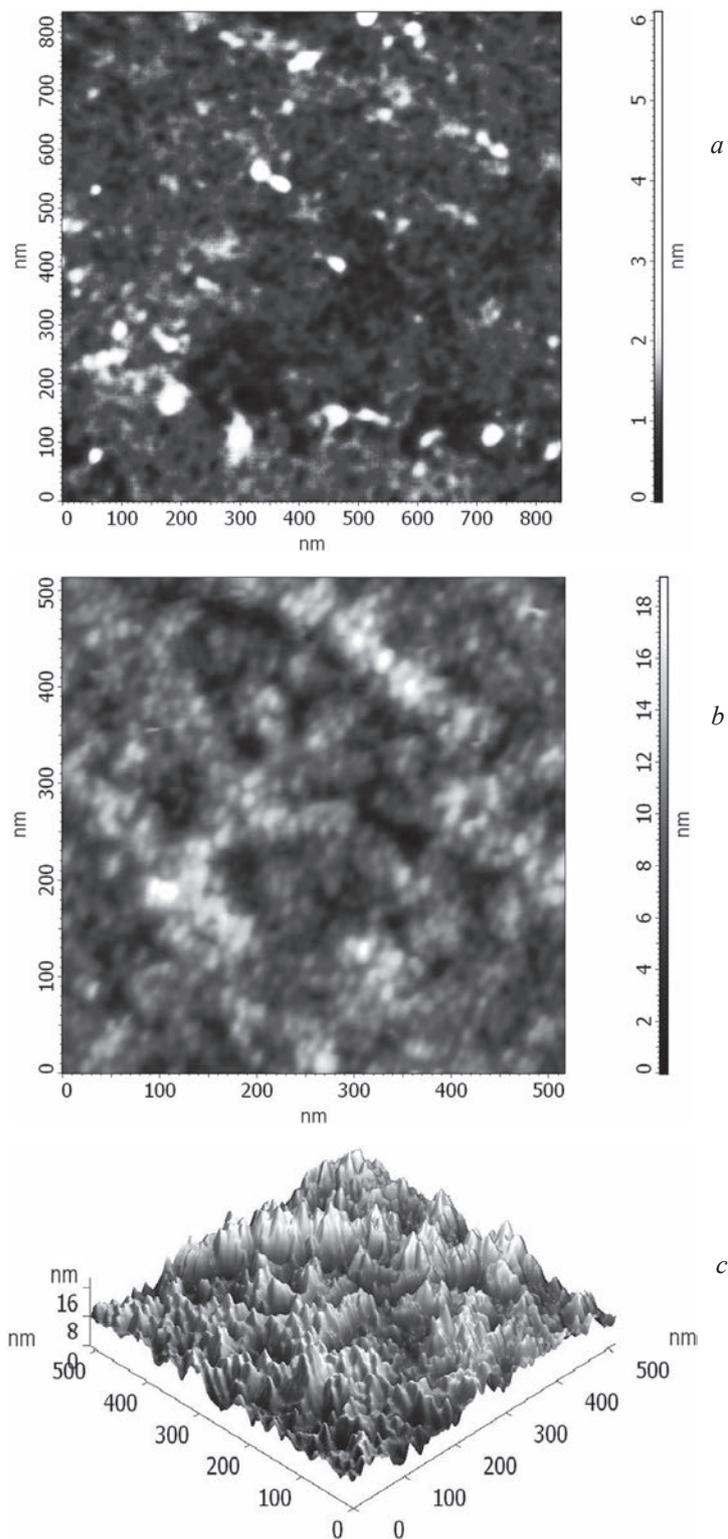


Рис. 1. АСМ-ізабражэнні паверхнасцей тонкай плёнкі NiPc (a) і двухслойнай наноструктуры П/NiPc/Ag (b, c) на шклянках; NiPc: $l \sim 10$ нм; Ag: ППМ $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ г/см², параметр перакрывання $\eta \sim 0,45$

Fig. 1. AFM-images of surfaces of NiPc thin film (a) and S/NiPc/Ag two-layered nanostructure (b, c) on glass substrates; NiPc: $l \sim 10$ nm; Ag: MSD $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ g/cm², overlap parameter $\eta \sim 0.45$

На рис. 2, a (крывая 1) прыведен спектр оптычнай шчынасці нанаслоя сярэбра з паверхнавай шчынасцю металу (ППМ) $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ г/см² на кварцавай падложцы. В абласці дзяржэнняў $\lambda \sim 400\text{--}550$ нм для гэтага слоя наблідаецца палоса ППРП з максімумам на дзяржэнні

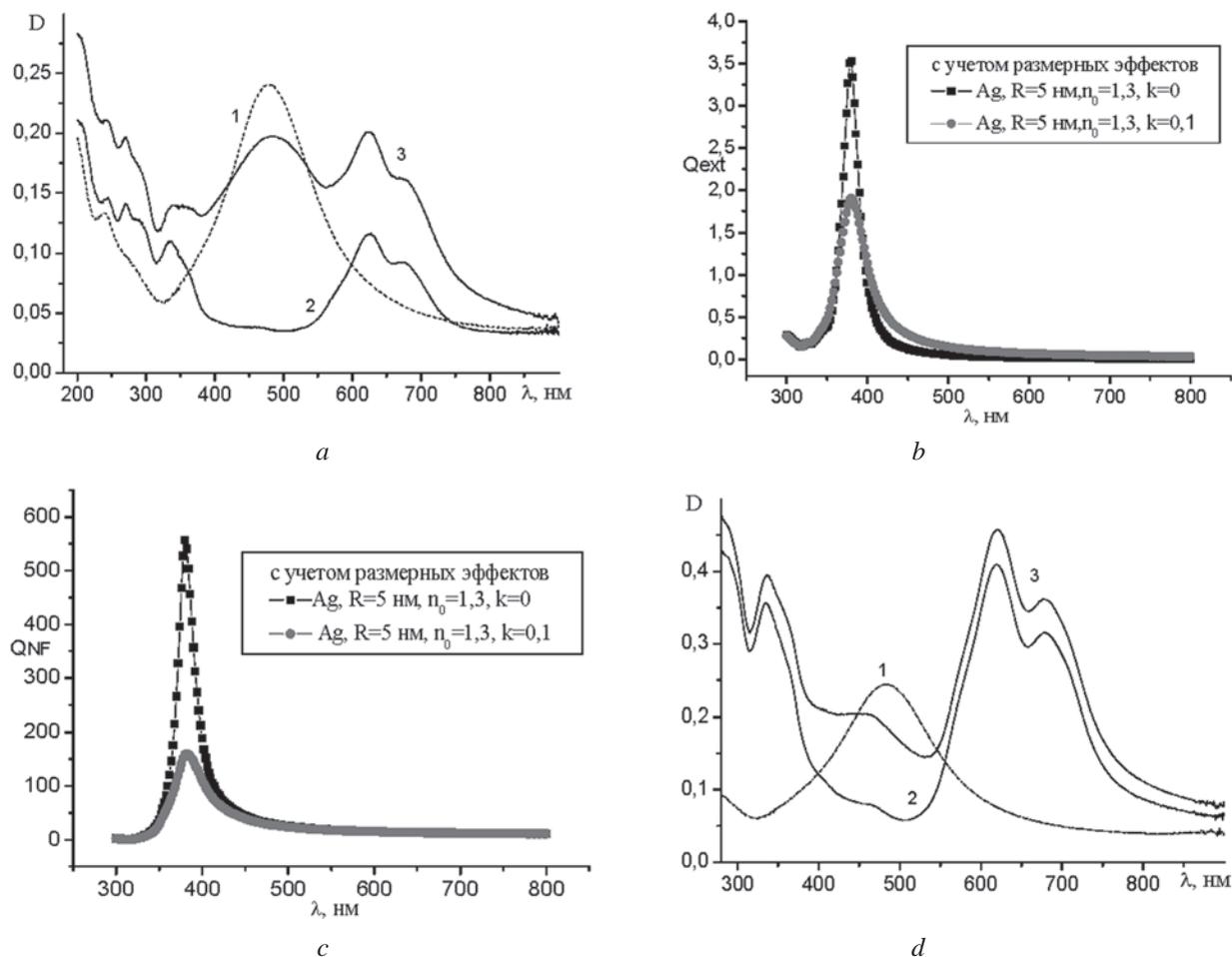


Рис. 2. Оптическая плотность нанослоя Ag (кривая 1, *a*, *d*), пленки NiPc (кривая 2) и наноструктуры П/NiPc/Ag (кривая 3) на кварцевых подложках; NiPc: $l \sim 10$ нм (*a*) и ~ 30 нм (*d*); Ag: ППМ $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ г/см², $\eta \sim 0,45$. Рассчитанные с использованием теории Ми факторы эффективности ослабления (*b*) и рассеяния в ближней зоне (*c*) для наносферы серебра ($R = 5$ нм) в матрице с $n_0 = 1,3$ без поглощения ($k = 0$) и с поглощением ($k = 0,1$)

Fig. 2. Optical density of Ag nanolayer (curve 1, *a*, *d*), NiPc film (curve 2) and S/NiPc/Ag nanostructure (curve 3) on quartz substrates; NiPc: $l \sim 10$ nm (*a*) and ~ 30 nm (*d*); Ag: MSD $\sim 2 \cdot 10^{-6}$ g/cm², $\eta \sim 0,45$. Efficiency factors of extinction (*b*) and scattering in near field (*c*) calculated with the use of the Mie theory for the silver nanosphere ($R = 5$ nm) in the matrix of $n_0 = 1.3$ without ($k = 0$) and with absorption ($k = 0.1$)

$\lambda = 485$ нм. Наличие этой полосы свидетельствует о том, что пленка Ag – наноструктурированная. Кривая 2 на рис. 2, *a* является спектральной характеристикой пленки NiPc толщиной ~ 10 нм, сформированной на кварцевой подложке. Данная пленка имеет полосы поглощения в УФ-диапазоне и на длинах волн 600–700 нм, связанные с электронными переходами (полосы *Core* и *Q* соответственно [10]). Полоса *Q* при этом состоит из двух компонент с максимумами на $\lambda = 625$ и $\lambda = 675$ нм, из которых более интенсивная – с максимумом на длине волны $\lambda = 625$ нм.

Кривая 3 на рис. 2, *a* соответствует оптической плотности двухслойной системы П/NiPc/Ag, расположенной на кварцевой подложке. Для этой системы в спектральном диапазоне $\lambda \sim 450$ –550 нм проявляется полоса ПППП, а на длинах волн $\lambda \sim 550$ –700 нм наблюдаются электронные полосы поглощения NiPc. Влияние наночастиц серебра на поглощение пленки фталоцианина никеля можно оценить, сравнивая оптическую плотность гибридной системы (кривая 3) с суммой оптических плотностей составляющих компонентов (кривые 1 и 2). Видно, что в присутствии наночастиц серебра достигается существенное увеличение оптической плотности пленки фталоцианина никеля в области электронных полос поглощения.

Интенсивность полосы поверхностного плазмонного резонансного поглощения в системе П/NiPc/Ag уменьшилась по сравнению с нанослоем Ag (кривая 1), что является следствием имеющих различия в свойствах поверхностей, на которые производилось осаждение серебра

при формировании нанослоя и двухслойной наноструктуры. Во-первых, шероховатость поверхности NiPc может быть причиной более высокой степени полидисперсности наночастиц серебра. Это должно привести к уширению полосы ПППП с одновременным уменьшением ее интенсивности. К тому же ослаблению полосы ПППП может способствовать наличие поглощения в нанослое NiPc, на котором размещены наночастицы серебра, подобно тому, как это происходит в поглощающих матрицах (см. рис. 2, *b*, *c*). Расчеты факторов эффективности ослабления (Q_{ext}) и рассеяния в ближней зоне (Q_{NF}) проводились с использованием теории Ми. Значения оптических постоянных серебра брались из [11]. Размерная зависимость оптических постоянных металлических наночастиц учитывалась в рамках модели ограничения длины свободного пробега электронов [12]. В соответствии с этой моделью диэлектрическая проницаемость, обусловленная вкладом свободных электронов, рассчитывается по формуле Друде с учетом увеличения постоянной затухания из-за столкновений свободных электронов с поверхностью, ограничивающей металл. Согласно [12], размерно-зависимая постоянная затухания имеет вид

$$\gamma_R = \gamma_0 + \frac{v_F}{L},$$

где v_F – скорость электрона на поверхности Ферми, γ_0 – средняя частота столкновений (т. е. постоянная затухания) в объемном веществе, а L – эффективная средняя длина пробега электрона до столкновения с границей. В предположении изотропного рассеяния на границе для сферической частицы $L = R$ (R – радиус частицы).

Как видно из рис. 2 *b*, *c*, в рассматриваемом случае увеличение мнимой части комплексного показателя преломления k от 0 до 0,1 приводит к существенному уменьшению факторов Q_{ext} и Q_{NF} . При этом особенно сильно уменьшается фактор рассеяния в ближней зоне Q_{NF} .

Рис. 2, *d* отличается от рис. 2, *a* тем, что толщина пленки NiPc здесь составляет ~ 30 нм. Увеличение толщины приводит к возрастанию интенсивности полос поглощения органического полупроводника в УФ- и видимом диапазонах. Однако относительный эффект усиления поглощения пленки NiPc в области 550–700 нм в присутствии плазмонных наночастиц существенно ниже по сравнению с более тонкой пленкой NiPc. Это связано с тем, что в пленке NiPc большей толщины лишь малая часть органического полупроводника попадает в зону усиления локального поля вблизи поверхности плазмонных наночастиц [13].

На рис. 3 приведены спектры оптической плотности наноструктуры П/Ag/NiPc (кривая 1), нанослоя Ag с ППМ $\sim 1,7 \cdot 10^{-6}$ г/см² (кривая 2), а также пленки NiPc толщиной ~ 10 нм (кривая 3), сформированных на стеклянных подложках. Видно, что в отличие от наноструктур П/NiPc/Ag, спектральные характеристики которых представлены выше, оптическая плотность двухслойной наноструктуры П/Ag/NiPc в области спектра $\lambda \sim 400$ –500 нм превышает оптическую плотность нанослоя Ag, т. е. в данном случае не происходит ослабления полосы плазмонного поглощения.

Для более детального установления степени влияния наночастиц серебра на оптические свойства пленок фталоцианина никеля нами была проведена обработка оптических спектров двухслойных наноструктур, заключающаяся в вычитании из них поглощения соответствующих

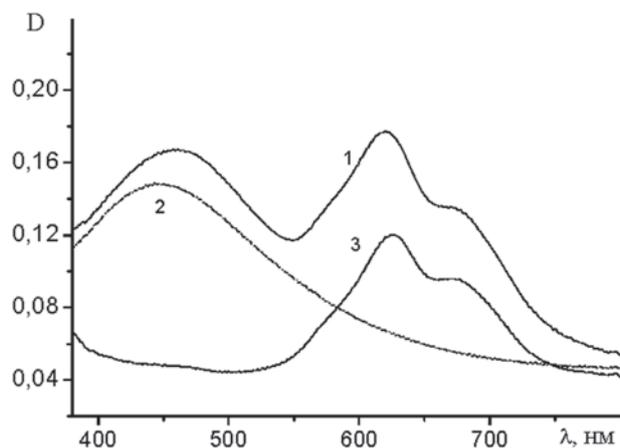


Рис. 3. Оптическая плотность наноструктуры П/Ag/NiPc (кривая 1), нанослоя Ag (кривая 2) и пленки NiPc (кривая 3) на стеклянных подложках; толщина NiPc ~ 10 нм
Fig. 3. Optical density of S/Ag/NiPc nanostructure (curve 1), Ag nanolayer (curve 2) and NiPc film (curve 3) on glass substrates; the NiPc film thickness of ~ 10 nm

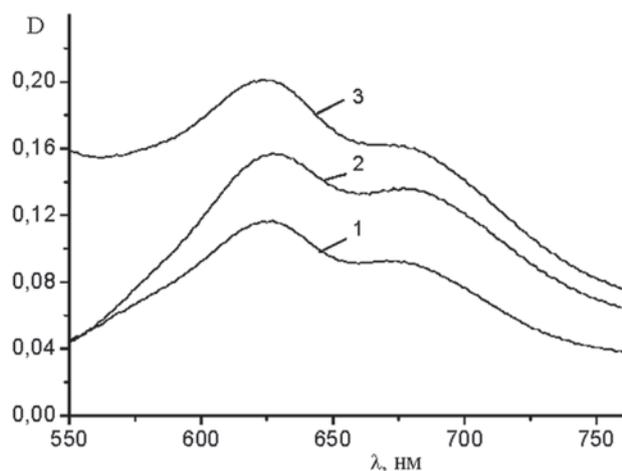


Рис. 4. Оптическая плотность пленки NiPc толщиной ~ 10 нм (кривая 1) и разностные спектры оптической плотности ($D_{\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) (кривая 2) и ($D_{\text{S}/\text{Ag}/\text{NiPc}} - D_{\text{Ag}}$) (кривая 3) таких же по толщине пленок NiPc, расположенных соответственно в наноструктурах $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$ и $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$

Fig. 4. Optical density of the NiPc film of the thickness of ~ 10 nm (curve 1) and differential spectra of optical density ($D_{\text{S}/\text{Ag}/\text{NiPc}} - D_{\text{Ag}}$) (curve 2) and ($D_{\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) (curve 3) for the NiPc films of the same thickness placed in the S/Ag/NiPc and S/NiPc/Ag nanostructures, respectively

нанослоев Ag. Разностные спектры оптической плотности ($D_{\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}} - D_{\text{Ag}}$) и ($D_{\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}} - D_{\text{Ag}}$) для систем $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$ и $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$ в спектральном диапазоне $\lambda > 550$ нм приведены на рис. 4 (кривые 2 и 3 соответственно). В этом спектральном диапазоне находятся полосы поглощения NiPc с максимумами на длинах волн 625 и 675 нм, а также располагается длинноволновое крыло полосы ПППП монослоя наночастиц Ag. Как видно из рис. 4, для пленки NiPc толщиной 10 нм, входящей в состав наноструктуры $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$, в области спектра $\lambda = 600\text{--}700$ нм достигается более высокое эффективное поглощение по сравнению с пленкой, расположенной в наноструктуре $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$. Наличие наночастиц Ag приводит к увеличению оптической плотности на длине волны $\lambda = 625$ нм для систем $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$ и $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$ соответственно на 25 и 33 %.

Такой результат может быть частично связан с особенностями формирования наноструктур в процессе термического осаждения. Для структуры $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$ осаждение NiPc происходит на уже сформированные на подложке наночастицы Ag, и молекулы органического полупроводника могут контактировать лишь с атомами серебра, находящимися на поверхности металлических наночастиц. Атомы серебра в наночастицах удерживаются достаточно сильными химическими связями, обусловленными взаимодействием ионов металла с валентными электронами, и их миграция в процессе осаждения органических молекул крайне затруднена. При осаждении серебра на NiPc на начальной стадии практически каждый атом металла может контактировать с поверхностью NiPc. Размеры молекул NiPc существенно превышают размеры атомов Ag, и поверхность органического полупроводника даже в пределах одной молекулы является для атомов Ag неоднородной по потенциалу. К тому же имеются области, где ван-дер-ваальсово взаимодействие между молекулами NiPc минимально (например, такая ситуация может реализоваться там, где пленка имеет аморфную структуру), а также такие, где это взаимодействие сильнее (крупные нанокристаллиты). В результате формирование в процессе термического осаждения нанослоя Ag может сопровождаться возникновением и накоплением значительных механических напряжений в наноструктуре, которые могут приводить к увеличению неоднородности рельефа поверхности NiPc вследствие ее деформации (см. рис. 1, *b*) и способствовать образованию большой площади интерфейса металл-органический полупроводник. В такой структуре при воздействии световых волн, несмотря на некоторое ослабление полосы ПППП, по-видимому достигается высокая интенсивность локального поля, приводящая к увеличению эффективного поглощения пленки NiPc.

Заключение. Таким образом, исследованы полученные термическим испарением в вакууме тонкие пленки NiPc и Ag, а также планарные гибридные наноструктуры $\Pi/\text{Ag}/\text{NiPc}$ и $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$, в которых нанометровые пленки органического полупроводника контактируют с нанослоями серебра. Показано, что наличие плазмонных наночастиц наиболее значительно усиливает эффективное поглощение пленки NiPc толщиной ~ 10 нм в наноструктуре $\Pi/\text{NiPc}/\text{Ag}$ в области электронных полос поглощения $\lambda \sim 600\text{--}700$ нм. Данный эффект проявляется за счет способности плазмонных наночастиц усиливать локальное поле вблизи своей поверхности на расстояниях, сравнимых с размерами наночастиц.

Благодарности

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф15-092).

Acknowledgements

This work was partially supported by the Belarusian Republican Foundation for Fundamental Research (Grant N F15-092)..

Список использованных источников

1. Leznoff, C. C. Phthalocyanines: properties and applications / C. C. Leznoff, A. B. P. Lever. – Weinheim: VCH, 1996. – Vol. 4. – 536 p.
2. Hohnholza, D. Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices / D. Hohnholza, S. Steinbrecherb, M. Hanacka // J. Mol. Struct. – 2000. – Vol. 521. – P. 231–237.
3. Itoh Eiji. Photovoltaic Properties of Organic *p-n* Junction Devices Consisting of Phthalocyanine and *n*-Type Porphyrin Deposited on an *n*-Type TiO₂ Layer / Itoh Eiji, Ohmori Yuji, Miyairi Keiichi // Japan. J. Appl. Phys. – 2004. – Vol. 43, no 2. – P. 817–821.
4. Van Flassen, E. Explanation of the low oxygen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors / E. Van Flassen, H. Kerp // Sens. Actuators B. – 2003. – Vol. 88. – P. 329–333.
5. Bohren, C. F. Absorption and Scattering of Light by Small Particles / C. F. Bohren, D. R. Huffman. – John Wiley&Sons, Inc., 1983. – 660 p.
6. Климов, В. В. Наноплазмоника / В. В. Климов. – М.: Физматлит, 2009. – 480 с.
7. Китайгородский, А. И. Молекулярные кристаллы / А. И. Китайгородский. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
8. Thin and ultra-thin films of nickel phthalocyanine grown on highly oriented pyrolytic graphite: an XPS, UHV, and air tapping mode AFM study / L. Ottaviano [et al.] // Surf. Sci. – 1977. – Vol. 373. – P. 318–332.
9. Поуп, М. Электронные процессы в органических кристаллах / М. Поуп, Ч. Свенберг. – М.: Мир, 1985. – Т. 2. – 168 с.
10. Electronic structure and spectrum third-order nonlinear optics of the metal phthalocyanines PcM (M= Zn, Ni, TiO) / W.-D. Cheng [et al.] // Phys. Rev. B. – 2001. – Vol. 64. – P. 125109–125109-11.
11. Johnson, P. Optical constants of the noble metals / P. Johnson, R. Christy // Phys. Rev. B. – 1972. – Vol. 6. – P. 4370–4379.
12. Width of cluster plasmon resonances: Bulk dielectric functions and chemical interface damping / H. Hovel [et al.] // Phys. Rev. B. – 1993. – Vol. 48. – P. 18148–18154.
13. Zamkovets, A. D. Near-field effects on spectral properties of layered silver-copper phthalocyanine nanocomposites / A. D. Zamkovets, A. N. Ponyavina // J. Appl. Spectrosc. – 2013. – Vol. 79, N 6. – P. 908–913.

References

1. Leznoff C.C., Lever A.B.P. *Phthalocyanines: properties and applications. Vol.4*. Weinheim: VCH, 1996. 536p.
2. Hohnholza D, Steinbrecherb S., Hanacka M. Applications of phthalocyanines in organic light emitting devices. *Journal of Molecular Structure*, 2000, vol. 521, no. 1–3, pp. 231–237. doi:10.1016/S0022-2860(99)00438-X.
3. Itoh E., Ohmori Y., Miyairi K. Photovoltaic Properties of Organic *p-n* Junction Devices Consisting of Phthalocyanine and *n*-Type Porphyrin Deposited on an *n*-Type TiO₂ Layer. *Japanese Journal of Applied Physics*, 2004, vol. 43, no. 2, pp. 817–821. doi: 10.1143/jjap.43.817.
4. Van Faassen E., Kerp H. Explanation of the low oxygen sensitivity of thin film phthalocyanine gas sensors. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2003, vol. 88, no. 3, pp. 329–333. doi: 10.1016/S0925-4005(02)00379-9.
5. Bohren C.F., Huffman D.R. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. John Wiley&Sons, Inc., 1983. 660 p.
6. Klimov V.V. *Nanoplasmonics*. Moscow, Fizmatlit, 2009. 480 p. (in Russian)
7. Kitaygorodskiy A.I. *Molecular crystals*. Moscow, Nauka, 1971. 424 p. (in Russian)
8. Ottaviano L., Di Nardo S., Lozzi L., Passacantando M., Picozzi P., Santucci S. Thin and ultra-thin films of nickel phthalocyanine grown on highly oriented pyrolytic graphite: an XPS, UHV, and air tapping mode AFM study. *Surface Science*, 1977, vol. 373, no. 2–3, pp. 318–332. doi:10.1016/S0039-6028(96)01179-X.
9. Pope M., Swenberg Ch. *Electronic Processes in Organic Crystals*. NY, Clarendon Press, 1982.
10. Cheng W.-D., Wu D.-S., Zhang H., Chen J.-T. Electronic structure and spectrum third-order nonlinear optics of the metal phthalocyanines PcM (M= Zn, Ni, TiO). *Physical Review B*, 2001, vol. 64, no. 12, pp. 125109–125109-11. doi: 10.1103/physrevb.64.125109.
11. Johnson P., Christy R. Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 1972, vol. 6, no. 12, pp. 4370–4379. doi: 10.1103/physrevb.6.4370.
12. Hovel H., Fritz S., Hilger A., Kreibig U., Vollmer M. Width of cluster plasmon resonances: Bulk dielectric functions and chemical interface damping. *Physical Review B*, 1993, vol.48, no. 24, pp.18148–18154. doi: 10.1103/physrevb.48.18178.
13. Zamkovets A.D., Ponyavina A.N. Near-field effects on spectral properties of layered silver-copper phthalocyanine nanocomposites. *Journal of Applied Spectroscopy*, 2013, vol. 79, no. 6, pp. 908–913. doi: 10.1007/s10812-013-9693-8.

Информация об авторах

Замковец Анатолий Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории физики инфракрасных лучей, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: a.zamkovets@dragon.bas-net.by

Понявина Алина Николаевна – доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник лаборатории физики инфракрасных лучей, Институт физики им. Б. И. Степанова Национальной академии наук Беларуси (пр. Независимости, 68, 220072, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: ponyavina@imaph.bas-net.by

Баран Людмила Владимировна – кандидат физико-математических наук, заведующий сектором обслуживания научных исследований на кафедре твердого тела, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: brlv@mail.ru

Для цитирования

Замковец, А. Д. Плазмонный резонанс в планарных слоистых наноструктурах серебро-фталоцианин никеля / А. Д. Замковец, А. Н. Понявина, Л. В. Баран // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 98–105.

Information about the authors

Zamkovets Anatoly Dmitrievich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher of the Laboratory of Physics of Infrared Rays, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: a.zamkovets@dragon.bas-net.by

Ponyavina Alina Nikolaevna – D. Sc. (Physics and Mathematics), Assistant Professor, Chief researcher of the Laboratory of Physics of Infrared Rays, B. I. Stepanov Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Belarus (68, Nezavisimosti Ave., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: ponyavina@imaph.bas-net.by

Baran Ludmila Vladimirovna – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Department for Scientific-Research Service, Department of Physics of Solid States, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: brlv@mail.ru

For citation

Zamkovets A. D., Ponyavina A.N., Baran L.V. Plasmon resonance in the planar layered silver-nickel phthalocyanine nanostructures. *Vesti Natsyional'noi akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 98–105. (in Russian)

ИНФОРМАТИКА
INFORMATICS

УДК 621-235:004:519.8

Поступила в редакцию 08.09.2016
Received 08.09.2016

N. N. Guschinsky¹, O. Battaia², A. Dolgui³

¹*United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus*

²*ISAE-Supaéro, Toulouse, France*

³*Ecole des Mines de Nantes, Nantes, France*

ON OPTIMIZATION OF PROCESSES FOR SEQUENTIAL BATCH MACHINING

A problem of optimal design of processes of sequential machining of multiple parts on rotary table machines is considered. Batches are processed in a given sequence. Parts of the same batch are located at the working positions of rotary table and are machined simultaneously. Operations are divided into groups which are performed by spindle heads or by turrets. Constraints on the design of spindle heads, turrets, and working positions, as well as on the order of operations are given. The problem is to minimize the estimated cost of machine equipment while reaching a given output. The proposed method to solve the problem is based on its formulation in terms of mixed integer linear programming. Computational results are reported.

Keywords: rotary table machine, optimization, sequential batch machining.

Н. Н. Гущинский¹, О. Баттайа², А. Долгий³

¹*Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси, Минск, Беларусь*

²*Высшая национальная школа авиации и космоса, Тулуза, Франция*

³*Горная школа Нанта, Нант, Франция*

К ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ ПАРТИЙ ДЕТАЛЕЙ

Рассматривается задача оптимального проектирования процессов последовательной обработки партий деталей на станках с поворотным столом. Последовательность обработки партий задана. Детали одной и той же партии устанавливаются на рабочих позициях станка и обрабатываются одновременно. Множество технологических переходов для обработки всех деталей разбивается на группы, которые выполняются с помощью шпиндельных или revolverных головок. Заданы ограничения, связанные с разбиением переходов по шпиндельным и revolverным головкам, рабочим позициям станка, а также порядком выполнения переходов. Задача заключается в минимизации оценки стоимости оборудования станка при обеспечении заданной производительности. Предлагаемый метод решения задачи основан на ее формулировке в терминах смешанного целочисленного линейного программирования. Приводятся результаты вычислительных экспериментов.

Ключевые слова: станок с поворотным столом, оптимизация, последовательная обработка партий.

Introduction. This paper deals with a problem of the optimal design of a rotary transfer machine with turrets for sequential machining of multiple parts. Such a machine is multi-positional, i. e. parts are sequentially machined on m (1, 2, ..., m) working positions. One position of the machine (zero) is exclusively used for loading new billets and unloading finished parts. At each working position, several machining modules (spindle heads) can be installed to process the operations assigned to this position. They are activated sequentially or simultaneously. Simultaneous activation is possible if machining modules are related to the different sides of the part and work in parallel. Sequential activation is realized by the use of turrets. There are horizontal and vertical spindle heads and turrets to access to different sides of parts on a working position.

We consider the case when there is only one vertical turret mounted at one position or one spindle head common for all working positions. There are several horizontal spindle heads or turrets. However, there is only one horizontal spindle head or turret per position.

At the preliminary design stage, the following decisions must be made: the choice of orientations of parts, the partitioning of the given set of operations into positions and machining modules, and the choice of cutting modes for each spindle head and turret.

Few studies on rotary transfer machines were published. Configuration of semi-automated systems with multi-turn rotary table was discussed in [1]. Mathematical models of transfer machines with rotary table were proposed in [2, 3]. The first mathematical model for the design of rotary transfer machines with turrets for machining a single part was presented in [4]. MIP models for parallel and sequential machining of multiple parts were considered in [5, 6].

Batch scheduling problems have been treated by many researchers. For an extensive review, we refer to [7]. Two types of batch machines can be distinguished: sum-batch and max-batch machines. On a sum-batch machine jobs are completed sequentially and the processing time of a batch is equal to the sum of the processing times of all the jobs in the batch [8]. A max-batch machine treats the jobs simultaneously and the processing time of a batch is equal to the time of the longest job [9].

1. Problem statement. We consider the problem of design of a rotary transfer machine with m working positions for machining d_0 types of parts with required output O^d , $d = 1, 2, \dots, d_0$. After finish of processing of O^d parts of type d the rotary transfer machine is reconfigured, i.e. the fixtures of parts are changed and some spindles are mounted or dismounted if necessary.

Let \mathbf{N}^d be the set of machining operations needed for machining of elements of the d^{th} part $d = 1, 2, \dots, d_0$, located on n_d sides and N_s^d , $s = 1, 2, \dots, n_d$, is a subset of operations for machining of elements of the s^{th} side of the part. The part d can be located at zero position in different orientations $\mathbf{H}(d)$ but elements of no more than one side can be machined by vertical spindle head or turret. All elements of other sides of the part have to be assigned to horizontal spindle heads or turrets. $\mathbf{H}(d)$ can be represented by matrix of dimension $r_d \times n_d$ where $h_{rs}(d)$ is equal j , $j = 1, 2$, if the elements from N_s^d can be machined by spindle head or turret of type j for such an orientation of the part d .

Let $\mathbf{N} = \bigcup_{d=1}^{d_0} \mathbf{N}^d$. All operations $p \in \mathbf{N}$ are characterized by the following parameters:

- the length $\lambda(p)$ of the working stroke for operation $p \in \mathbf{N}$;
 - range $[\gamma_1(p), \gamma_2(p)]$ of feasible values of feed rate;
 - set $H(p)$ of feasible orientations of the part (indexes $r \in \{1, 2, \dots, r_d\}$ of rows of matrix $\mathbf{H}(d)$) for execution of operation $p \in N_s^d$ by spindle head or turret of type j (vertical if $h_{rs}(d) = 1$ and horizontal if $h_{rs}(d) = 2$).
- Obviously, there is no solution exists if $\bigcap_{p \in N_s^d} H(p) = \emptyset$ for some $d \in \{1, 2, \dots, d_0\}$ and $s \in \{1, 2, \dots, n_d\}$.

Let N_k , $k = 1, \dots, m$, be a subset of operations from \mathbf{N} assigned to the k^{th} working position; N_{k1} and N_{k2} be the sets of operations assigned to working position k that are concerned by vertical and horizontal machining, respectively; b_{kj} be the number of machining modules of type j installed at the k^{th} working position; N_{kjl} , $l = 1, \dots, b_{kj}$, be subsets of operations from N_{kj} assigned to the l^{th} machining module of type j at the k^{th} working position.

This assignment has to take into account the following technological constraints:

- possible sequences of operations for machining parts (precedence constraints);
- the necessity to perform some pairs of operations from \mathbf{N} at the same working position, by the same turret, by the same machining module (inclusion constraints);
- the impossibility to perform some pairs of operations from \mathbf{N} at the same working position, by the same turret, by the same machining module (exclusion constraints);
- the maximal number m_0 of working positions and the maximal number b_0 of machining modules in a turret;
- feasible orientations of the part for execution of each operation;
- the impossibility to perform operations from N_s^d by machining modules of different types;
- the productivity providing the given output.

The precedence constraints can be specified by a directed graph $G^{OR} = (\mathbf{N}, D^{OR})$ where an arc $(p, q) \in D^{OR}$ if and only if the operation p has to be executed before the operation q . It should be noted that if such operations p and q belong to different sides of the part then they cannot be executed at the same position without violating the precedence constraint.

The inclusion constraints can be given by undirected graphs $G^{SM} = (\mathbf{N}, E^{SM})$, $G^{ST} = (\mathbf{N}, E^{ST})$, and $G^{SP} = (\mathbf{N}, E^{SP})$ where the edge $(p, q) \in E^{SM}$ ($(p, q) \in E^{ST}$, $(p, q) \in E^{SP}$) if and only if the operations p and q must be executed in the same machining module (turret, position).

The exclusion constraints can also be defined by undirected graphs $G^{DM} = (\mathbf{N}, E^{DM})$, $G^{DT} = (\mathbf{N}, E^{DT})$, and $G^{DP} = (\mathbf{N}, E^{DP})$ where the edge $(p, q) \in E^{DM}$ ($(p, q) \in E^{DT}$, $(p, q) \in E^{DP}$) if and only if the operations p and q cannot be executed in the same machining module (turret, position).

It is assumed that infeasible combinations of part orientations are given by a set E^{DH} , each element of which $e = \{(d_1, r_1), (d_2, r_2), \dots, (d_k, r_k)\}$ represents a collection of pairs (part number d and row number of $\mathbf{H}(d)$) that prohibit simultaneously orientation r_1 for part d_1 , orientation r_2 for part d_2 , and orientation r_k for part d_k . Obviously, the set E^{DH} includes $\{(r', d'), (r'', d'')\}$ if there exist $p \in N_{s'}^{d'}$, $s' \in \{1, \dots, n_{d'}\}$, $q \in N_{s''}^{d''}$, $s'' \in \{1, \dots, n_{d''}\}$ such that $(p, q) \in E^{SM} \cup E^{ST}$ and $h_{r', s'}(d') \neq h_{r'', s''}(d'')$.

Let $P = \langle P_1, \dots, P_k, \dots, P_m \rangle$ is a design decision with $P_k = (P_{1k11}, P_{2k11}, \dots, P_{d_0k11}, \dots, P_{1k1b_{k1}}, P_{2k1b_{k1}}, \dots, P_{d_0k1b_{k1}}, P_{1k21}, P_{2k21}, \dots, P_{d_0k21}, \dots, P_{1k2b_{k2}}, P_{2k2b_{k2}}, \dots, P_{d_0k2b_{k2}})$, $P_{dkjl} = (N_{dkjl}^p, \Gamma_{dkjl})$, $P_{dkj} = (P_{dkjl} | l=1, \dots, b_{kj})$, $P_{dk} = (P_{dkj} | j=1, 2)$, and $N_j = \bigcup_{d=1}^{d_0} \bigcup_{k=1}^m \bigcup_{l=1}^{b_{kj}} N_{dkjl}$, $j = 1, 2$.

The execution time $t^b(P_{dkjl})$ of operations from N_{dkjl} with the feed per minute $\Gamma_{dkjl} \in [\max\{\gamma_1(p) | p \in N_{dkjl}\}, \min\{\gamma_2(p) | p \in N_{dkjl}\}]$ is equal to $t^b(P_{dkjl}) = L(N_{dkjl}) / \Gamma_{dkjl} + \tau^a$, where $L(N_{dkjl}) = \max\{\lambda(p) | p \in N_{dkjl}\}$, and τ^a is an additional time for advance and disengagement of tools. We assume that only time needed for rotation of the turret between nonempty sets N_{dkjl} is taken into account and the execution time is equal to $t^h(P_{dkj}) = \tau^s (l_{\max}^d(P_{dkj}) - l_{\min}^d(P_{dkj})) + \sum_{l=1}^{b_{kj}} t^b(P_{dkjl})$, $j = 1, 2$, where τ^s is an additional time for one rotation of turret, $l_{\max}^d(P_{dkj}) = \max\{l = 1, 2, \dots, b_{kj} | N_{dkjl} \neq \emptyset\}$ and $l_{\min}^d(P_{dkj}) = \min\{l = 1, 2, \dots, b_{kj} | N_{dkjl} \neq \emptyset\}$, respectively. The execution time $t^p(P_{dk})$ is defined as $t^p(P_{dk}) = \tau^r + \max\{t^h(P_{dkj}) | j = 1, 2\}$, where τ^r is an additional time for table rotation. Then the time t_d for machining all the elements of d^{th} part is equal to $t^d(P) = \max\{t^p(P_{dk}) | k = 1, \dots, m\}$.

We assume that the given productivity is provided, if the total time $T(P)$ for machining O^d parts does not exceed the available time T_0 , i. e. $T(P) = \sum_{d=1}^{d_0} t^d(P)(O^d + m - 1) \leq T_0$. We take into account that at the beginning and the end of machining of O^d parts not all the working positions are occupied.

It is easy to see that the constraint on the productivity is provided if and only if it satisfied for $\Gamma_{dkjl} = \min\{\gamma_2(p) | p \in N_{dkjl}\}$, $d = 1, \dots, d_0$, $k = 1, \dots, m$, $j = 1, 2$, $l = 1, \dots, b_{kj}$.

Let C_1 , C_2 , C_3 , and C_4 be the relative costs for one position, one turret, one machining module of a turret, and one spindle head respectively. Since the vertical spindle head (if it presents) is common for several positions its size (and therefore the cost) depends on the number of positions to be covered. Let k_{\min}^h and k_{\max}^h be the minimal and the maximal position of the common vertical spindle head. Then its cost can be estimated as $C_4 + (k_{\max}^h - k_{\min}^h)C_5$ where C_5 is the relative cost for covering one additional position by vertical spindle head. If the vertical spindle turret is installed its cost can be estimated by $C_2 + C_3 b_{k1}$. In the similar way the cost $C(b_{k2})$ for performing set of operations N_{k2} by associated b_{k2} machining modules can be assessed as follows:

$$C(b_{k2}) = \begin{cases} 0 & \text{if } b_{k2} = 0, \\ C_4 & \text{if } b_{k2} = 1, \\ C_2 + C_3 b_{k2} & \text{if } b_{k2} > 1. \end{cases}$$

The machine cost $Q(P)$ is calculated as the total cost of all equipment used i. e.

$$Q(P) = C_1 m + C_4 \operatorname{sign}(|N_1|) (1 - \sum_{k=1}^m \operatorname{sign}(|N_{k12}|)) + \sum_{k=1}^m \operatorname{sign}(|N_{k12}|) (C_2 + C_3 b_{k1}) + \\ + C_5 (k_{\max}^h - k_{\min}^h) + \sum_{k=1}^m C(b_{k2})$$

where $\operatorname{sign}(a) = 1$ if $a > 0$, and $\operatorname{sign}(a) = 0$ if $a \leq 0$.

The studied problem is to determine:

the number of positions m ;

orientations of parts $H(d)$;

the number b_{kj} of machining modules of type j ($j = 1$ for vertical and $j = 2$ for horizontal) installed at the k^{th} position, $k = 1, \dots, m$;

subsets N_{dkjl} of operations from \mathbf{N}^d assigned to the l^{th} machining module of type j at the k^{th} position, $d = 1, 2, \dots, d_0$, $k = 1, \dots, m$, $l = 1, \dots, b_{kj}$;

the feed per minute Γ_{dkjl} for each subset N_{dkjl} , $d = 1, 2, \dots, d_0$, $k = 1, \dots, m$, $j = 1, 2$, $l = 1, \dots, b_{kj}$ in such a way that the machine cost is small as possible and all the constraints are not violated.

It is easy to see that if P is an optimal solution of the considered problem then the design decision P' with $P'_{dkjl} = (N_{dkjl}, \min\{\gamma_2(p) | p \in N_{dkjl}\})$ is also optimal. This property is used in MIP formulation of the problem.

2. MIP formulation. Let us introduce the following notation:

X_{pkjl} – a decision variable which is equal to 1 if the operation p from \mathbf{N} is assigned to the l^{th} machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position;

Y_j^{ds} – an auxiliary variable which is equal to 1 if at least one operation from N_s^d is executed by spindle head or turret of type j ;

Y_{kjl}^d – an auxiliary variable which is equal to 1 if at least one operation for machining elements of the d^{th} part is executed in the l^{th} machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position;

Y_{kjl} – an auxiliary variable which is equal to 1 if the l^{th} machining module of spindle head or turret type j is installed at the k^{th} position;

$l_{kj \max}^d$ – an auxiliary variable for estimation of the last machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position for machining elements of the d^{th} part;

$l_{kj \min}^d$ – an auxiliary variable for estimation of the first machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position for machining elements of the d^{th} part;

$Y_{1 \min}$ – an auxiliary variable which is equal to k if k is the minimal position covered by vertical spindle head or turret;

$Y_{1 \max}$ – an auxiliary variable which is equal to k if k is the maximal position covered by vertical spindle head or turret;

Y_1 – an auxiliary variable which is equal to 1 if the vertical spindle head or turret is installed;

Z_k – an auxiliary variable which is equal to 1 if at least one operation is assigned to the k^{th} position;

h_r^d – an auxiliary variable which is equal to 1 if elements of the d^{th} part are machined with the r^{th} orientation;

F_{kjl}^d – an auxiliary variable for determining the time of execution of operations from \mathbf{N}^d in the l^{th} machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position;

F^d – an auxiliary variable for determining the time of execution of all the operations from \mathbf{N}^d ;

T_k^d – an auxiliary variable which is equal to F^d if the k^{th} position exists and 0 otherwise;

t_{pq} – minimal time necessary for execution of operations p and q in the same machining module, $t_{pq} = \max(\lambda(p), \lambda(q)) / \min(\gamma_2(p), \gamma_2(q)) + \tau^a$.

It is assumed that $(p, q) \in E^{DM}$ if $\min(\gamma_2(p), \gamma_2(q)) < \max(\gamma_1(p), \gamma_1(q))$.

The number of variables and constraints can be reduced by using set \mathbf{N}' instead of \mathbf{N} . The set \mathbf{N}' is built based on graph G^{SM} . Let $G_i^{SM} = (N_i^{SM}, E_i^{SM})$, $i = 1, \dots, n^{SM}$, be connectivity components of G^{SM}

including isolated vertices. Only one vertex (operation) \wp_i is chosen from each N_i^{SM} and included into \mathbf{N} . Later $\chi(p)=\wp_i$ for all $p \in N_i^{SM}$.

2.1. Cost calculation. The objective can be represented as follows:

$$\min C_1 \sum_{k=1}^{m_0} Z_k + C_4 \sum_{k=1}^{m_0} Y_{k21} + (C_2 + 2C_3 - C_4) \sum_{k=1}^{m_0} \sum_{j=1}^2 Y_{kj2} + C_3 \sum_{k=1}^{m_0} \sum_{j=1}^2 \sum_{l=3}^{b_0} Y_{kjl} + C_4 Y_1 + C_5 (Y_{1\max} - Y_{1\min}). \quad (1)$$

If the horizontal turret is installed at position k then $Y_{k21} = Y_{k22} = 1$ and $C_4 Y_{k21} + (C_2 + 2C_3 - C_4) Y_{k22} = C_2 + 2C_3$. If the horizontal spindle head is installed at position k then $Y_{k2l} = 0, l=2, \dots, b_0$, and $C_4 Y_{k21} + (C_2 + 2C_3 - C_4) Y_{k22} = C_4$. If the vertical turret is installed at position k then $Y_{k11} = Y_{k12} = 1, Y_1 = 1, Y_{1\min} = Y_{1\max}$ and $(C_2 + 2C_3 - C_4) Y_{k12} + C_4 Y_1 + C_5 (Y_{1\max} - Y_{1\min}) = C_2 + 2C_3$. If the vertical spindle head is installed common for positions $k_1 = Y_{1\min}, \dots, k_v = Y_{1\max}$ then $Y_1 = 1, Y_{k1l} = 0, l = 2, \dots, b_0, k = 1, \dots, m_0$ and $C_4 Y_1 + (C_2 + 2C_3 - C_4) \sum_{k=1}^{m_0} Y_{k12} = C_4$.

Variables $Z_k, k = 1, \dots, m_0$ and Y_1 should satisfy the following constraints:

$$Y_1 \leq \sum_{m=1}^{m_0} Y_{k11}, \quad (2)$$

$$\sum_{m=1}^{m_0} Y_{k11} \leq m_0 Y_1, \quad (3)$$

$$Z_k \leq Y_{k11} + Y_{k21}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad (4)$$

$$Y_{k11} + Y_{k21} \leq 2Z_k, \quad k = 1, \dots, m_0. \quad (5)$$

Since the objective function (1) is minimized variables $Y_{1\min}$ and $Y_{1\max}$ can be defined by the following constraints:

$$(m_0 - k + 1) Y_{k11} + Y_{1\min} \leq m_0 + 1, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad (6)$$

$$Y_{1\max} \geq k Y_{k11}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad (7)$$

$$Y_{1\max} \leq m_0 Y_1, \quad (8)$$

$$Y_{1\min} \leq m_0 Y_1. \quad (9)$$

If there is no vertical machining in the design decision ($Y_1 = 0$) then both $Y_{1\max}$ and $Y_{1\min}$ are equal to 0 due to (8) and (9). If the vertical turret is installed at position k ($Y_{k11} = 1$, and $Y_{k'11} = 0, k' \neq k$) then $Y_{1\min} \leq k$ and $Y_{1\max} \geq k$ due to (6) and (7). In this case $C_5 (Y_{1\max} - Y_{1\min})$ is minimal if $Y_{1\max} = Y_{1\min} = k$. If the vertical spindle head is installed common for positions $k_1 = k', \dots, k_v = k''$ then $Y_{1\min} \leq k'$ and $Y_{1\max} \geq k''$ due to (7) and (8) and $C_5 (Y_{1\max} - Y_{1\min})$ is minimal if and only if $Y_{1\min} = k'$ and $Y_{1\max} = k''$.

2.2. Time calculation. The time of execution of operations from \mathbf{N}^d by the l^{th} machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position cannot be less than the time of execution of any operation from \mathbf{N}^d assigned to this machining module:

$$F_{kjl}^d \geq t_{qq} X_{\chi(q)kl}, \quad q \in \mathbf{N}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0. \quad (10)$$

The time of execution of operations from \mathbf{N}^d by the l^{th} machining module of spindle head or turret type j at the k^{th} position cannot be less than the time of execution of any pair of operations from \mathbf{N}^d assigned to this machining module:

$$F_{kjl}^d \geq t_{pq} (X_{\chi(p)kl} + X_{\chi(q)kl} - 1), \quad p, q \in \mathbf{N}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad (p, q) \notin E^{DP} \cup E^{DB}, \quad p < q, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0. \quad (11)$$

The time of execution of operations from \mathbf{N}^d cannot be less than the time of execution of vertical and horizontal spindle head or turret at each of m_0 positions:

$$F^d \geq \tau^r + \sum_{l=1}^{b_0} F_{kjl}^d + \tau^g (l_{kj\max}^d - l_{kj\min}^d), \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad (12)$$

where variables $l_{kj\max}^d$ and $l_{kj\min}^d$ can be defined by the following constraints:

$$(b_0 - l + 1)Y_{kjl}^d + l_{kj \min}^d \leq b_0 + 1, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (13)$$

$$l_{kj \max}^d \geq lY_{k11}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (14)$$

$$l_{kj \max}^d \leq b_0 \sum_{l=1}^{b_0} Y_{kjl}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad (15)$$

$$l_{kj \min}^d \leq b_0 \sum_{l=1}^{b_0} Y_{kjl}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2. \quad (16)$$

If there no operations from \mathbf{N}^d assigned to spindle head or turret of type j at the k^{th} position ($Y_{kjl}^d = 0, l = 1, \dots, b_0$) then $l_{kj \max}^d = l_{kj \min}^d = 0$ due to (15) and (16). If operations from \mathbf{N}^d are executed by machining modules $l_1 = l', \dots, l_v = l''$ then $l_{kj \min}^d \leq l'$ and $l_{kj \max}^d \geq l''$ due to (13) and (14).

Variables T_k^d are defined by constraints:

$$T_k^d \geq F^d - T_0(1 - Z_k), \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0. \quad (17)$$

Then the productivity constraint can be expressed as follows:

$$\sum_{d=1}^{d_0} (F^d O^d + \sum_{k=1}^{m_0} T_k^d - F^d) \leq T_0. \quad (18)$$

2.3. Assignment constraints. Each operation is assigned to one block

$$\sum_{k=1}^{m_0} \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{pkjl} = 1, \quad p \in \mathbf{N}'. \quad (19)$$

Each predecessor q of the operation p assigned to the l^{th} machining module of spindle head or turret of type j at the k^{th} position has to be executed at the previous positions or the previous machining module of the corresponding turret

$$\sum_{k'=1}^{k-1} \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)k'j'l'} + \sum_{l'=1}^{l-1} X_{\chi(q)kjl'} \geq X_{\chi(p)kjl}, \quad (p, q) \in D^{OR}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0. \quad (20)$$

Inclusion and exclusion constraints for working positions, turrets, and machining modules are expressed by (21)–(26).

$$\sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} = \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)kjl}, \quad (p, q) \in E^{SP}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad (21)$$

$$\sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} = \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)kjl}, \quad (p, q) \in E^{ST}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad (22)$$

$$\sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} + \sum_{j=1}^2 \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)kjl} \leq 1, \quad (p, q) \in E^{DP}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad (23)$$

$$\sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} + \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)kjl} + Y_{kj2} \leq 2, \quad (p, q) \in E^{DT}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad (24)$$

$$X_{\chi(p)kjl} + X_{\chi(q)kjl} \leq 1; \quad (p, q) \in E^{DM}, \quad p, q \in \mathbf{N}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0. \quad (25)$$

For operations p that cannot be executed in spindle head or turret type j

$$X_{\chi(p)kjl} = 0; \quad p \in N_s^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad s = 1, \dots, n_d, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad \{h_{rs}(d) = j \mid r = 1, \dots, r_d\} = \emptyset, \quad l = 1, \dots, b_0. \quad (26)$$

Operations p from N_s^d have to be assigned to the same type of spindle head or turret

$$\sum_{k=1}^{m_0} \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} = \sum_{k=1}^{m_0} \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(q)kjl}, \quad p, q \in N_s^d, \quad j = 1, 2, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad s = 1, \dots, n_d. \quad (27)$$

The following constraints define variables Y_{kjl}^d , Y_{kjl} and Y_j^{ds} . They take 1 if and only if the corresponding sums are not equal 0.

$$Y_{kjl}^d \leq \sum_{p \in \mathbf{N}^d} X_{\chi(p)kjl}, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (28)$$

$$\sum_{p \in \mathbf{N}^d} X_{\chi(p)kjl} \leq |\mathbf{N}^d| Y_{kjl}^d, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (29)$$

$$Y_{kjl} \leq \sum_{d=1}^{d_0} Y_{kjl}^d, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (30)$$

$$\sum_{d=1}^{d_0} Y_{kjl}^d \leq d_0 Y_{kjl}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (31)$$

$$Y_j^{ds} \leq \sum_{p \in \mathbf{N}_s^d} \sum_{k=1}^{m_0} \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl}, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad j = 1, 2, \quad (32)$$

$$\sum_{p \in \mathbf{N}_s^d} \sum_{k=1}^{m_0} \sum_{l=1}^{b_0} X_{\chi(p)kjl} \leq |\mathbf{N}_s^d| Y_j^{ds}, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad j = 1, 2. \quad (33)$$

Operations from at most one side for d^{th} part can be assigned to the vertical spindle head or turret

$$\sum_{s=1}^{n_d} Y_1^{ds} \leq 1, \quad d = 1, \dots, d_0. \quad (34)$$

The constraints which prohibit empty machining modules:

$$Y_{kjl-1} \geq Y_{kjl}, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 2, \dots, b_0. \quad (35)$$

Vertical turret cannot be located with horizontal tables

$$Y_{k12} + Y_{k21} \leq 1, \quad k = 1, \dots, m_0. \quad (36)$$

Variables h_r^d can be defined by the following constraints:

$$h_r^d \geq 1 - \sum_{s=1}^{n_d} \sum_{j=1, j \neq h_{rs}(d)}^2 Y_j^{ds}, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad r = 1, \dots, n_d, \quad (37)$$

$$\sum_{r=1}^{r_d} h_r^d = 1, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad (38)$$

$$\sum_{(r,d) \in e} h_r^d \leq |e| - 1, \quad e \in E^{DH}. \quad (39)$$

If the orientation $(h_{r_1}(d), h_{r_2}(d), \dots, h_{r_{n_d}}(d))$ is chosen for the part d , then variables $Y_j^{ds'} = 0$ for $d = 1, \dots, d_0$, $s' = 1, \dots, n_d$, $s' \neq s$, $j = 1, 2$, $j \neq h_{rs}(d)$. Therefore $\sum_{s=1}^{n_d} \sum_{j=1, j \neq h_{rs}(d)}^2 Y_j^{ds} = 0$, $h_r^d = 1$ due to (37), and $h_{r'}^d = 0$ for $r' = 1, \dots, r_d$, $r' \neq r$, due to (38). Constraints (39) forbid to choose infeasible combinations of part orientations.

2.4. Bound constraints.

$$X_{pkjl} \in \{0, 1\}; \quad p \in \mathbf{N}^d, \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (40)$$

$$Y_j^{ds} \in \{0, 1\}; \quad k = 1, \dots, m_0, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad s = 1, \dots, n_d, \quad (41)$$

$$Y_{kjl}^d \in \{0, 1\}; \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad (42)$$

$$Y_{kjl} \in \{0, 1\}; \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad l = 1, \dots, b_0, \quad (43)$$

$$l_{kj \max}^d, l_{kj \min}^d \in \{0, 1, \dots, b_0\}; \quad k = 1, \dots, m_0, \quad j = 1, 2, \quad d = 1, \dots, d_0, \quad (44)$$

$$Y_{1\min}, Y_{1\max} \in \{0, 1, \dots, m_0\}; k = 1, \dots, m_0, j = 1, 2, l = 1, \dots, b_0, \tag{45}$$

$$Y_1 \in \{0, 1\}, \tag{46}$$

$$Z_k \in \{0, 1\}; k = 1, \dots, m_0, \tag{47}$$

$$F_{kjl}^d \in [0, t^{\bar{d}} - \tau^r]; k = 1, \dots, m_0, j = 1, 2, l = 1, \dots, b_0, d = 1, \dots, d_0, \tag{48}$$

$$F^d \in [t^{\bar{d}}, t^{\bar{d}}], d = 1, \dots, d_0, \tag{49}$$

where $t^{\bar{d}} = \max\{\lambda(p)/\gamma_2(p) + \tau^a + \tau^r | p \in \mathbf{N}^d\}$ and $t^{\bar{d}} = (T_0 - \sum_{d'=1, d' \neq d}^{d_0} t^{d'} O^{d'}) / O^d$.

2.5. Estimation of m_0 . It is obviously that the number of variables and the number of constraints in model (1)–(49) depends on m_0 . This value can be refined as $\lfloor (UB-LB)/C_1 \rfloor$ where UB is an upper bound of the objective function (1) and LB is a lower bound of the cost of equipment i.e. the cost of turrets, spindle heads and machining modules needed to accomplish machining of all the parts. For finding UB the heuristics [10] can be used. LB can be determined in the following way.

Let $\mathbf{H} = \{H = (H(1), H(2), \dots, H(d_0)) | H(d) \in \mathbf{H}(d), d = 1, 2, \dots, d_0\}$ be the set of all possible orientations of parts. Then $LB = \min\{LC_1(H) + LC_2(H) | H \in \mathbf{H}\}$ where $LC_1(H)$ and $LC_2(H)$ are lower bounds on the equipment cost for vertical and horizontal machining with the orientation H of parts. They can be estimated as follows:

$$LC_1(H) = \begin{cases} C_4 + C_5(LM_1(H) - 1), & \text{if } LM_1(H) > b_0, \\ \min[C_4 + C_5(LM_1(H) - 1), C_2 + C_3 LM_1(H)], & \text{otherwise,} \end{cases}$$

$$LC_2(H) = \min[C_4 LM_2(H), C_2 \lceil LM_2(H) / b_0 \rceil + C_3 LM_2(H)],$$

where $LM_1(H)$ and $LM_2(H)$ are lower bounds on the number of machining modules for vertical and horizontal machining with the orientation H of parts. They can be calculated using algorithms [3].

3. Experimental study. The purpose of this study is to evaluate the effectiveness of the proposed techniques. There were generated series of 100 test instances for batches of 4, 6, 8 and 10 parts. Their characteristics are presented in Table 1 where $|\mathbf{N}|$ is the number of operations, OSP is the order strength of precedence constraints; DM, DT, DP, and SM are the densities of graphs G^{DM} , G^{DT} , G^{DP} , and G^{SM} respectively. Constraints were generated using tools [11]. Experiments were carried out on ASUS notebook (1.86 Ghz, 4 Gb RAM) with academic version of CPLEX 12.2.

Table 1. Parameters of problems

Number of parts	Parameters of problems	$ \mathbf{N} $	OSP	DM	DT	DP	SM
4	Minimal value	44	0.034	0.064	0.026	0	0.027
	Maximal value	95	0.525	0.659	0.659	0.242	0.067
	Average value	69	0.106	0.373	0.348	0.024	0.04
6	Minimal value	89	0.029	0.003	0.002	0	0.024
	Maximal value	159	0.471	0.462	0.462	0.205	0.088
	Average value	124	0.29	0.228	0.197	0.027	0.043
8	Minimal value	118	0.023	0.003	0.002	0	0.024
	Maximal value	216	0.456	0.438	0.417	0.214	0.09
	Average value	165	0.288	0.197	0.168	0.025	0.045
10	Minimal value	251	0.023	0.025	0	0	0.014
	Maximal value	255	0.447	0.58	0.47	0.194	0.071
	Average value	254	0.164	0.326	0.183	0.032	0.024

First, we compare the effectiveness of refinement of m_0 in accordance with section 2.5 for tests with 4 parts. The results are presented in Table 2. With refinement of m_0 the total time for solving all test instances was reduced in 3 times and 49 instances were solved in 20 sec. For one instance, m_0 was not refined and its time solution was greater than without refinement.

Table 2. Effectiveness of refinement of m_0

Parameters	$m_0 = 8$	Refined m_0
Minimal time (sec)	10.890	5.321
Maximal time (sec)	2039.800	2101.840
Average time (sec)	173.903	58.399
Total time (sec)	17390.300	5839.910

Then we change the procedure of refinement of m_0 . We set m_0 to be equal to the number of positions of heuristic solution. Finally, we present the results of solving 4 series of 100 test instances for 4, 6, 8, and 10 parts with such a refinement. The maximal available time was set to 2 hours (7200 sec). The calculation results are presented in Table 3. Two test instances for 8 parts were not solved optimally during this time (gap is 21 and 27 %). For 10 parts only 35 test instances were solved optimally. Moreover academic version of CPLEX was not capable to solve 54 test instances (out of memory).

Table 3. Time solution of test instances

Parameters	4 parts	6 parts	8 parts	10 parts
Minimal time (sec)	3.78	6.98	0.93	15.90
Maximal time (sec)	713.80	7193.40	7200	7200
Average time (sec)	21.23	630.23	1210.97	1185.60
Number of solved problems	100	100	100	46
Number of problems with proven optimality	100	100	98	35

Conclusion. A problem of design of rotary transfer machines has been studied. The problem is to choose the orientation of parts and to assign the manufacturing operations to positions in order to minimize the equipment cost. The improved version of MIP formulation is proposed. Experiments show that the MIP approach is applicable up to 8 parts and 200 operations. Further development will concern the design of machining lines consisting of several rotary transfer machines.

References

1. Battini D., Faccio M., Ferrari E., Persona A., Sgarbossa F. Design configuration for a mixed-model assembly system in case of low product demand. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 2007, vol. 34, no. 1, pp. 188–200. doi: 10.1007/s00170-006-0576-5.
2. Battaia O., Dolgui A., Guschinsky N., Levin G. A decision support system for design of mass production machining lines composed of stations with rotary or mobile table. *Robotics and Computer-Integrated Manufacturing*, 2012, vol. 28, no. 6, pp. 672–680. doi:10.1016/j.rcim.2012.04.005.
3. Dolgui A., Guschinsky N.N., Levin G.M. Graph approach for optimal design of transfer machine with rotary table. *International Journal of Production Research*, 2009, vol. 47, no. 2, pp. 321–341. doi:10.1080/00207540802425880.
4. Battaia O., Dolgui A., Guschinsky N., Levin G. Combinatorial techniques to optimally customize an automated production line with rotary transfer and turrets, *IIE Transactions*, 2014, vol. 46, no. 9, pp. 867–879. doi:10.1080/0740817X.2013.849837.
5. Battaia O., Dolgui A., Guschinsky N., Levin G. *MIP approach to design of rotary transfer machines with turrets*. Saint Etienne, 2013. 35 p. (Research Report / LIMOS; CNRS UMR 6158, RR-13-08).
6. Battaia O., Dolgui A., Guschinsky N., Levin G. Parallel Machining of Multiple Parts on Rotary Transfer Machines with Turrets. *IFAC Proceedings Volumes. 7th IFAC Conference on Manufacturing Modelling, Management, and Control*, 2013, vol. 46, no. 9, pp. 1477–1482. doi:10.3182/20130619-3-RU-3018.00373.
7. Potts C.N., Kovalyov M. Scheduling with batching: A review. *European Journal of Operational Research*. 2000, vol. 120, no. 2, pp. 228–249. doi:10.1016/S0377-2217(99)00153-8.
8. Gribkovskaia I.V., Lee Ch.Y., Strusevich V.A., Werra D. Three is easy, two is hard: open shop sum-batch scheduling problem refined. *Operations Research Letters*, 2006, vol. 34, no. 4, pp. 459–464. doi: 10.1016/j.orl.2005.07.006.
9. Koh S.G., Koo P.H., Kim D.C., Hur W.S. Scheduling a single batch processing machine with arbitrary job sizes and incompatible job families. *International Journal of Production Economics*, 2005, vol. 98, no. 1, pp. 81–96. doi:10.1016/j.ijpe.2004.10.001.
10. Battaia O., Dolgui A., Guschinsky N. Heuristic algorithms for synthesis of batch manufacturing processes at re-configurable modular transfer machines. *Tanaevskie chteniia: materialy 6-i mezhd. nauch. konf.* [Tanaev's Readings: Proceedings of the 6th International Conference]. Minsk, 2013, pp. 9–13. (in Russian)
11. Dolgui A., Guschinskaya O., Guschinsky N., Levin G. Decision making and support tools for design of machining systems. *Encyclopedia of Decision Making and Decision Support Technologies. Vol. 1*. NY, Information Science Reference, 2008, pp. 155–164.

Информация об авторах

Гущинский Николай Николаевич – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией исследования операций, Объединенный институт проблем информатики Национальной академии наук Беларуси (ул. Сурганова, 6, г. Минск, 220012, Республика Беларусь). E-mail: gyshin@newman.bas-net.by

Баттайа Ольга – доктор наук, профессор, профессор кафедры проектирования сложных технических систем, Высший институт авиации и космоса (пр. Э. Беллин, 10, 31400, г. Тулуза, Франция). E-mail: olga.battaia@isae.fr

Долгий Александр – доктор наук, профессор, заведующий кафедрой автоматизации, информатики и управления производством, Горная школа Нанта (ул. Альфреда Кастлера, 4, 20722, г. Нант, Франция). E-mail: alexandre.dolgui@mines_nantes.fr

Для цитирования

Гущинский, Н. Н. К оптимизации процессов последовательной обработки партий деталей / Н. Н. Гущинский, О. Баттайа, А. Долгий // Вес. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 106–115.

Information about authors

Guschinsky Nikolai Nikolaevich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Head of the Operational Research Laboratory, United Institute of Informatics Problems of the National Academy of Sciences (6, Sarganov Str., 220012, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: gyshin@newman.bas-net.by

Battaia Olga – Dr. habil., Professor, Professor of the Department of Complex Systems Engineering, Institut Supérieur de l’Aéronautique et de l’Espace (10, Ave. E. Belin, 31400, Toulouse, France). E-mail: olga.battaia@isae.fr

Dolgui Alexandre – Dr. habil., Professor, Head of the Automation, Production and Computer Sciences Department. Ecole des Mines de Nantes (4, rue Alfred Kastler – B.P. 20722, F-44307 NANTES Cedex 3, France). E-mail: alexandre.dolgui@mines_nantes.fr

For citation

Guschinsky N.N. , Battaia O., Dolgui A. Optimization of the processes for sequential batch machining. *Vestsi Natsyianal'nai akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 106–115.

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ
SHORT COMMUNICATIONS

УДК 517.955.32

Поступила в редакцию 04.11.2016
Received 04.11.2016

Н. И. Юрчук, Е. Н. Новиков

Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

**НЕОБХОДИМЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ СУЩЕСТВОВАНИЯ КЛАССИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ
УРАВНЕНИЯ КОЛЕБАНИЙ ПОЛУОГРАНИЧЕННОЙ СТРУНЫ**

Если неоднородное уравнение колебаний полуограниченной струны имеет некоторое классическое решение в первой четверти плоскости, то правая часть этого уравнения очевидно непрерывна. В работе доказывается, что в этом случае специальный интеграл от этой правой части, который является лишь обобщенным решением неоднородного уравнения колебаний полуограниченной струны, имеет вторые непрерывные производные и, следовательно, является его классическим решением. Это обобщенное решение отличается от известного обобщенного решения данного уравнения в верхней полуплоскости наличием модуля от пространственной переменной в подынтегральной функции, которой является непрерывная правая часть уравнения. Доказанное утверждение можно использовать для выявления соответствующих необходимых требований гладкости на правую часть уравнения колебаний струны для существования классических решений различных смешанных задачах в четверти и полуполосе плоскости.

Ключевые слова: неоднородное уравнение колебаний струны, классическое решение, обобщенное решение, необходимое требование гладкости.

N. I. Yurchuk, E. N. Novikov

Belarusian State University, Minsk, Belarus

**NECESSARY CONDITIONS FOR EXISTENCE OF CLASSICAL SOLUTIONS
TO THE EQUATION OF SEMI-BOUNDED STRING VIBRATION**

If the inhomogeneous equation of semi-bounded string vibration is a classical solution in the first quadrant, then the right-hand side of this equation is obviously continuous. We prove that in this case, a special integral of this right-hand side, which is a generalized solution of the inhomogeneous equation for semi-bounded string vibration, has continuous second derivatives and it is therefore a classical solution. This generalized solution differs from the known generalized solution of this equation in the presence of the upper half of the module of the spatial variable in the integrand, which is a continuous right-hand side of the equation. This assertion can be used to identify the corresponding necessary smoothness requirements on the right-hand side of the equation for string vibration for the existence of classical solutions of different mixed problems in the quarter and the half-plane.

Keywords: inhomogeneous equation of string vibration, classical solution, generalized solution, necessary smoothness requirement.

Введение. Если неоднородное уравнение колебаний полуограниченной струны имеет некоторое классическое решение в первой четверти плоскости, то правая часть этого уравнения очевидно непрерывна. Настоящая работа посвящена исследованию гладкости специального интеграла, который для непрерывной правой части неоднородного уравнения колебаний полуограниченной струны является лишь его обобщенным решением в первой четверти плоскости. Это обобщенное решение отличается от известного обобщенного решения такого же уравнения в верхней полуплоскости наличием модуля от пространственной переменной в подынтегральной функции, которой служит правая часть уравнения колебаний струны. В работе доказывается, что в этом случае специальный интеграл от этой правой части также является дважды непрерывно дифференцируемой функцией и классическим решением этого уравнения. В случае дважды

непрерывной дифференцируемости специального интеграла его можно найти методом Дюамеля [1]. Доказанное утверждение может быть использовано для выявления необходимых условий существования классических решений различных смешанных задач для уравнения колебаний струны [2–4].

Формулировка и доказательство утверждения. Обозначим символом $C^k(\Omega)$ множество k раз непрерывно дифференцируемых функций на множестве Ω . Справедливо

У т в е р ж д е н и е. Если $u \in C^2(G_\infty)$ – некоторое классическое решение уравнения

$$\partial_{tt}u(x,t) - a^2\partial_{xx}u(x,t) = f(x,t), \quad a > 0, \quad \{x,t\} \in G_\infty = [0, \infty[\times [0, \infty[, \quad (1)$$

в первой четверти плоскости, то $f \in C(G_\infty)$ и функция $F(x,t) = \frac{1}{2a} \int_0^t \int_{x-a(t-\tau)}^{x+a(t-\tau)} f(|s|, \tau) ds d\tau \in C^2(G_\infty)$.

Доказательство. Пусть u – классическое решение уравнения (1). Тогда из $u \in C^2(G_\infty)$ следует, что правая часть $f = \partial_{tt}u(x,t) - a^2\partial_{xx}u(x,t) \in C(G_\infty)$ и функция $F \in C^1(G_\infty)$ является лишь обобщенным решением уравнения (1). Под таким обобщенным решением уравнения (1) понимаем функцию $F \in C^1(G_\infty)$, которая удовлетворяет уравнению

$$\int_0^\infty \int_0^\infty (\partial_t + a\partial_x) F(x,t) (\partial_t - a\partial_x) \varphi(x,t) dx dt = - \int_0^\infty \int_0^\infty f(x,t) \varphi(x,t) dx dt, \quad (2)$$

для любой функции $\varphi \in C_0^1(G_\infty)$, имеющей компактный носитель в G_∞ и $\varphi|_{x=+\infty} = 0, t \in [0, \infty[, \varphi|_{t=+\infty} = 0, x \in [0, \infty[$. Любую точку $(x_0, t_0) \in G_\infty$ можно поместить внутрь трапеции $G_0 = \{(x,t) : 0 \leq x + at \leq M = x_0 + at_0 + (a+1)\varepsilon_0, 0 \leq t \leq T = t_0 + \varepsilon_0\}, \varepsilon_0 > 0$. Всегда существует такая последовательность функций $f_n(x,t) \in C^1(G_0)$, которая сходится при $n \rightarrow \infty$ к функции $f(x,t) \in C(G_0)$ равномерно на компактном множестве G_0 . Для исходных данных $f_n \in C^1(G_0)$ и $u \in C^2(G_0)$ вторая смешанная задача

$$\partial_{tt}u_n(x,t) - a^2\partial_{xx}u_n(x,t) = f_n(x,t), \quad a > 0, \quad \{x,t\} \in G_0, \quad (3)$$

$$u_n|_{t=0} = u|_{t=0}, \quad \partial_t u_n|_{t=0} = \partial_t u|_{t=0}, \quad 0 \leq x \leq M - at, \quad t \in [0, T], \quad (4)$$

$$\partial_x u_n|_{x=0} = \partial_x u|_{x=0}, \quad t \in [0, T], \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5)$$

имеет единственные классические решения [4]

$$(u_n)_-(x,t) = \frac{u(x+at,0) + u(x-at,0)}{2} + \frac{1}{2a} \int_{x-at}^{x+at} \partial_\tau u(\xi, \tau)|_{\tau=0} d\xi + \frac{1}{2a} \int_0^t \int_{x-a(t-\tau)}^{x+a(t-\tau)} f_n(s, \tau) ds d\tau, \quad (x,t) \in G_- \cap G_0, \quad G_- = \{(x,t) \in G_\infty, x > at, t > 0\}, \quad (6)$$

$$(u_n)_+(x,t) = \frac{u(x+at,0) + u(at-x,0)}{2} + \frac{1}{2a} \int_0^{x+at} \partial_\tau u(\xi, \tau)|_{\tau=0} d\xi + \frac{1}{2a} \int_0^{at-x} \partial_\tau u(\xi, \tau)|_{\tau=0} d\xi - a \int_0^{\frac{t-x}{a}} \partial_\xi u(\xi, \tau)|_{\xi=0} d\xi + \frac{1}{2a} \int_0^t \int_{x-a(t-\tau)}^{x+a(t-\tau)} f_n(|s|, \tau) ds d\tau, \quad (x,t) \in G_+ \cap G_0, \quad G_+ = \{(x,t) \in G_\infty, x \leq at, x \geq 0\}. \quad (7)$$

В этом легко убедиться непосредственной подстановкой (6) и (7) в (3)–(5), так как соответствующие достаточные требования гладкости и условия согласования на исходные данные второй смешанной задачи (3)–(5) очевидно выполняются [4].

Функции $v_n(x,t) = u(x,t) - u_n(x,t) \in C^2(G_0)$, как разность функций из $C^2(G_0)$, являются классическими решениями второй смешанной задачи

$$\partial_{tt} v_n(x, t) - a^2 \partial_{xx} v_n(x, t) = f(x, t) - f_n(x, t) = \tilde{f}_n(x, t), \quad a > 0, \quad \{x, t\} \in G_0, \quad (8)$$

$$v_n|_{t=0} = 0, \quad \partial_t v_n|_{t=0} = 0, \quad 0 \leq x \leq M_0 - at, \quad t \in [0, T], \quad (9)$$

$$\partial_x v_n|_{x=0} = 0, \quad t \in [0, T], \quad n = 1, 2, \dots \quad (10)$$

Для ее решений справедливо энергетическое неравенство (априорная оценка):

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \int_0^{M-at} (|\partial_t v_n(x, t)|^2 + |\partial_x v_n(x, t)|^2 + |v_n(x, t)|^2) dx \leq c_0 \int_{G_0} |f(x, t) - f_n(x, t)|^2 dx dt, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (11)$$

где $c_0 = (16T^3 + 4T) / (\min(1, a^2))$.

Докажем неравенство (11). Для любого $\tau \in]0, T[$ левую часть уравнения (8) умножаем на $2\partial_t v_n$, интегрируем по x и t на множестве $G^\tau = \{(x, t) : x \in [0, M - at], t \in [0, \tau]\}$ и приходим к равенствам

$$\begin{aligned} 2 \int_{G^\tau} (\partial_{tt} v_n - a^2 \partial_{xx} v_n) \partial_t v_n dx dt &= \int_0^\tau \int_0^{M-at} \left[\partial_t \left((\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right) - 2a^2 \partial_x (\partial_x v_n \partial_t v_n) \right] dx dt = \\ &= \int_0^{M-at} \left[(\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right] dx \Big|_{t=\tau} - \int_0^{M-at} \left[(\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right] dx \Big|_{t=0} + \\ &+ 2a^2 \int_0^\tau [\partial_x v_n \partial_t v_n] dt \Big|_{x=0} + a \int_0^\tau \left((\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right) \Big|_{x=M-at} dt - 2a^2 \int_0^\tau [\partial_x v_n \partial_t v_n] dt \Big|_{x=M-at}. \end{aligned} \quad (12)$$

Интеграл (12) оценивается снизу величиной

$$\left(\int_0^{M-at} \left[(\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right] dx \right) \Big|_{t=\tau}, \quad (13)$$

так как в правой части равенства (12) второй и третий интегралы обращаются в нуль в силу однородных начальных условий (9) и граничного условия (10), предпоследний интеграл неотрицательный, а последний интеграл после замены $x = M - at$ в производной $\partial_x v_n = \partial_t v_n \partial_x t = -\partial_t v_n / a$, равный интегралу

$$-2a^2 \int_0^\tau [\partial_x v_n \partial_t v_n] dt \Big|_{x=M-at} = 2a \int_0^\tau (\partial_t v_n)^2 dt \Big|_{x=M-at} \geq 0,$$

также неотрицательный. Теперь правую часть уравнения (8) умножаем на $2\partial_t v_n$, интегрируем по x и t на множестве G^τ и результат оцениваем сверху с помощью неравенства Коши – Буняковского, неравенства $2ab \leq \varepsilon a^2 + b^2 / \varepsilon, \varepsilon > 0$, при $\varepsilon = 1 / (2T)$, и элементарных оценок:

$$\begin{aligned} 2 \int_{G^\tau} \partial_t v_n \tilde{f}_n dx dt &\leq 2 \int_{G^\tau} |\partial_t v_n| |\tilde{f}_n| dx dt \leq 2 \sqrt{\int_{G^\tau} |\partial_t v_n|^2 dx dt} \sqrt{\int_{G^\tau} |\tilde{f}_n|^2 dx dt} \leq \\ &\leq \varepsilon \int_{G^\tau} |\partial_t v_n|^2 dx dt + \frac{1}{\varepsilon} \int_{G^\tau} |\tilde{f}_n|^2 dx dt \leq \varepsilon T \sup_{0 \leq t \leq \tau} \int_0^{M-at} |\partial_t v_n|^2 dx + \frac{1}{\varepsilon} \int_{G^\tau} |\tilde{f}_n|^2 dx dt = \\ &= \frac{1}{2} \sup_{0 \leq t \leq \tau} \int_0^{M-at} |\partial_t v_n|^2 dx + 2T \int_{G^\tau} |\tilde{f}_n|^2 dx dt. \end{aligned} \quad (14)$$

Из оценки снизу (13) и неравенства (14) следует неравенство

$$\int_0^{M-at} \left[(\partial_t v_n)^2 + a^2 (\partial_x v_n)^2 \right] dx \Big|_{t=\tau} \leq \frac{1}{2} \sup_{0 \leq t \leq T} \int_0^{M-at} |\partial_t v_n|^2 dx + 2T \int_{G_0} |\tilde{f}_n|^2 dx dt. \quad (15)$$

Правая часть этого неравенства не зависит от τ . Тогда в левой его части возьмем точную верхнюю грань по $t = \tau$ от 0 до T и в результате получим неравенство

$$\int_0^{M-at} [(\partial_t v_n)^2 + (\partial_x v_n)^2] dx \Big|_{t=\tau} \leq \frac{4T}{\min(1, a^2)} \int_{G_0} |\tilde{f}_n|^2 dx dt. \quad (16)$$

Так как для любого $\tau \in]0, T]$ справедливо неравенство

$$\sup_{0 \leq t \leq T} \int_0^{M-at} |v_n(x, t)|^2 dx \leq 4T^2 \sup_{0 \leq t \leq T} \int_0^{M-at} |\partial_t v_n(x, t)|^2 dx, \quad (17)$$

то из неравенств (16) и (17) вытекает неравенство (11).

Из неравенства (11) следует, что последовательность v_n при $n \rightarrow \infty$ равномерно сходится на множестве G_0 к нулю и, следовательно, u_n при $n \rightarrow \infty$ равномерно сходится на G_0 к u , так как согласно теореме вложения Соболева имеет место непрерывное и плотное вложение пространств $W_2^1(\Omega) \subset C(\bar{\Omega})$ для ограниченных множеств $\Omega \subset \mathbb{R}$. Поэтому в решениях (6), (7) переходим к пределу при $n \rightarrow \infty$ и получаем равенства

$$u_-(x, t) = \frac{u(x + at, 0) + u(x - at, 0)}{2} + \frac{1}{2a} \int_{x-at}^{x+at} \partial_\tau u(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} d\xi + F(x, t), \quad (18)$$

$$u_+(x, t) = \frac{u(x + at, 0) + u(at - x, 0)}{2} + \frac{1}{2a} \int_0^{x+at} \partial_\tau u(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} d\xi + \\ + \frac{1}{2a} \int_0^{at-x} \partial_\tau u(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} d\xi - a \int_0^{t-x/a} \partial_\xi u(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} d\xi + F(x, t) \quad (19)$$

соответственно в $G_- \cap G_0$ и $G_+ \cap G_0$. Из равенств (18) и (19) вытекает, что $F \in C^2(G_0)$, так как в этих равенствах все остальные слагаемые принадлежат множеству $C^2(G_0)$ в силу $u \in C^2(G_0)$. Отсюда, в частности, имеем, что F дважды непрерывно дифференцируемая в каждой точке $(x_0, t_0) \in G_\infty$.

Заключение. Из доказанного утверждения следует, что функция $F(x, t)$ является классическим решением уравнения

$$\partial_{tt} F(x, t) - a^2 \partial_{xx} F(x, t) = f(x, t). \quad (20)$$

Действительно, интегрируя по частям в левой части равенства (2), получаем равенство

$$\int_0^\infty \int_0^\infty [\partial_{tt} F(x, t) - a^2 \partial_{xx} F(x, t)] \varphi(x, t) dx dt = \int_0^\infty \int_0^\infty f(x, t) \varphi(x, t) dx dt.$$

Так как функция φ произвольная и принадлежит плотному в $L_2(G_\infty)$ множеству, то из последнего равенства следует, что функция $F(x, t)$ удовлетворяет уравнению (20) и, следовательно, является классическим решением уравнения колебаний струны (1).

Список использованной литературы

1. Корзюк, В. И. Уравнения математической физики. – Минск: БГУ, 2011. – 459 с.
2. Барановская, С. Н. Смешанная задача для уравнения колебания струны с зависящей от времени кривой производной в краевом условии / С. Н. Барановская, Н. И. Юрчук // Дифференц. уравнения. – 2009. – Т. 45, № 8. – С. 1188–1191.
3. Ломовцев, Ф. Е. Метод Дюамеля решения неоднородного уравнения колебаний полуограниченной струны с кривой производной в нестационарном граничном условии / Ф. Е. Ломовцев, Е. Н. Новиков // Вестн. Белорус. гос. ун-та. Сер. 1, Физика. Математика. Информатика. – 2012. – № 1. – С. 83–86.
4. Ломовцев, Ф. Е. Смешанная задача для неоднородного уравнения колебаний ограниченной струны при первых косых производных в нестационарных граничных условиях / Ф. Е. Ломовцев, Е. Н. Новиков // Воронеж. зимняя мат. школа: материалы Междунар. конф., Воронеж. 27 янв. – 2 февр. 2015 г. – Воронеж: Изд. дом ВГУ, 2015. – С. 73–76.

References

1. Korzyuk V.I. *Equations of mathematical physics*. Minsk, Belarusian State University, 2011. 459 p. (in Russian)
2. Baranovskaya S.N., Yurchuk N.I. Mixed problem for the string vibration equation with a time-dependent oblique derivative in the boundary condition. *Differential equations*, 2009, vol. 45, no. 8, pp. 1188–1191. doi:10.1134/S0012266109080126.
3. Lomovtsev F.E., Novikov E.N. Duhamel's method of solving the inhomogeneous equation semi-infinite string vibration oblique derivative in a non-stationary boundary conditions. *Vestnik Belorusskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 1. Fizika. Matematika. Informatika* [Vestn. Belarusian. St. Univ. Ser. 1. Physics. Mathematics. Computer science], 2012, no. 1, pp. 83–86. (in Russian)
4. Lomovtsev F.E., Novikov E.N. Mixed problem for the inhomogeneous wave equation finite string at the first oblique derivatives in non-stationary boundary conditions. *Voronezhskaya zimnyaya matematicheskaya shkola: materialy Mezhdunarodnoi konferentsii* [Mathematical School: Materials International conference]. Voronezh, VSU Publishing House, 2015, pp. 73–76. (in Russian)

Информация об авторах

Юрчук Николай Иосифович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математической кибернетики механико-математического факультета, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: yurchuk@bsu.by

Новиков Евгений Николаевич – аспирант, Белорусский государственный университет (пр. Независимости, 4, 220030, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: novikovevgenij@gmail.com

Для цитирования

Юрчук, Н. И. Необходимые условия для существования классических решений уравнения колебаний пологограниченной струны / Н. И. Юрчук, Е. Н. Новиков // Вест. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 116–120.

Information about the authors

Yurchuk Nikolai Iosifovich – D. Sc. (Physics and Mathematics), Professor of the Department of Mathematical Cybernetics of the Faculty of Mechanics and Mathematics, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: yurchuk@bsu.by

Novikov Eugenij Nikolaevich – Postgraduate, Belarusian State University (4, Nezavisimosti Ave., 220030, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: novikovevgenij@gmail.com

For citation

Yurchuk N.I., Novikov E.N. Necessary conditions for existence of classical solutions to the equation of semi-bounded string vibration. *Vesti Natsyional'nai akademii navuk Belarusi. Seriya fizika-matematichnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 116–120. (in Russian)

**ПЕРЕЧЕНЬ СТАТЕЙ, ОПУБЛИКОВАННЫХ В ЖУРНАЛЕ
«ВЕСЦІ НАЦЫЯНАЛЬНАЙ АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ.
СЕРЫЯ ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ НАВУК» в 2016 году**

МАТЕМАТИКА

Амелькин В. В., Василевич М. Н. Построение методом ВКБ решения дифференциальной системы, возникающей в задаче Римана – Гильберта	№ 1. С. 17–20
Астровский А. И. Равномерная наблюдаемость и системы наблюдения в форме Шварца	№ 1. С. 28–35
Беняш-Кривец В. В., Говорушко И. О. Многообразия представлений групп Баумслэга – Солитера в случае не взаимно простых показателей	№ 1. С. 52–56
Во Тхи Ким Туен. Монотонные разностные схемы для модели Шнэкенберг	№ 4. С. 38–46
Воробьев Н. Н., Кузнецова А. Р. Об индуктивных решетках насыщенных формаций	№ 4. С. 18–22
Гайшун И. В., Горячкин В. В. Робастная и интервальная наблюдаемость двухпараметрических дискретных систем с интервальными коэффициентами	№ 2. С. 6–9
Гринь А. А., Кузьмич А. В. Точные оценки предельных циклов автономных систем с тремя точками покоя на плоскости	№ 4. С. 7–17
Деменчук А. К. Задача управления асинхронным спектром линейных квазипериодических систем с блочным представлением усреднения матрицы коэффициентов	№ 3. С. 12–15
Жук Е. Е. Статистическое определение ближайших стационарных временных рядов в пространстве коэффициентов авторегрессии	№ 1. С. 46–55
Картынный Ю. А. Алгоритмические свойства связанных окрестностных множеств в графах	№ 3. С. 30–37
Каянович С. С. Краевая задача для стержневого течения в канале	№ 4. С. 55–66
Кирилюк Д. И. Критерии самосовмещения и центроиды многоугольников n -арных групп	№ 3. С. 58–65
Корзюк В. И. Задачи сопряжения уравнений Пуассона	№ 1. С. 5–16
Корзюк В. И., Винь Н. В. Классические решения смешанных задач для одномерного биволнового уравнения	№ 1. С. 69–79
Корзюк В. И., Нгуен Ван Винь. Классическое решение задачи с интегральным условием для одномерного биволнового уравнения	№ 3. С. 16–29
Корзюк В. И., Пузырный С. И. Классическое решение смешанных задач для одномерного волнового уравнения с негладкими условиями Коши	№ 2. С. 22–31
Ле Минь Хиеу. Безусловно монотонные разностные схемы второго порядка аппроксимации на равномерных сетках для Гамма-уравнения	№ 4. С. 47–54
Ломовцев Ф. Е. Необходимые и достаточные условия вынужденных колебаний полуограниченной струны с первой характеристической косою производной в нестационарном граничном условии	№ 1. С. 21–27
Ломовцев Ф. Е., Юрчук Н. И. Решение начально-краевой задачи для нестрого гиперболического уравнения при смешанных граничных условиях в четверти плоскости.	№ 3. С. 51–57
Малютин В. Б. Вычисление функциональных интегралов с помощью последовательностей Штурма	№ 4. С. 32–37
Муха В. С. Симметричная аппроксимация векторных статистических данных линейными многообразиями	№ 4. С. 23–31
Сарванов В. И., Ефимов О. В. Построение расписаний для двухстадийной системы обслуживания типа flowshop с блокировками	№ 1. С. 57–68
Харин А. Ю., Тон Тхат Ту. Последовательная статистическая проверка гипотез о параметрах временных рядов с трендом при пропусках наблюдений	№ 3. С. 38–46
Харин Ю. С., Журак М. К. Асимптотический анализ оценок максимального правдоподобия параметров биномиальной условно авторегрессионной модели пространственно-временных данных	№ 1. С. 36–45
Харин Ю. С., Палуха В. Ю. Статистические оценки энтропии Реньи и Тсаллиса и их использование для проверки гипотез о «чистой случайности»	№ 2. С. 37–47
Чумаков Ф. В., Василец С. И. Об одном интегральном уравнении первого рода с полярно-логарифмическим ядром	№ 2. С. 10–15
Чумаков Ф. В., Василец С. И. Решение одного вида интегрального уравнения первого рода с логарифмическим ядром и смешанными коэффициентами	№ 3. С. 47–50
Янович Л. А., Гуло И. Н. Вычисление моментов случайных процессов, задаваемых тригонометрическими функциями от броуновского движения	№ 2. С. 16–21
Янчевский В. И. Группы Уайтхеда, приведенные нормы и цикличность специальных алгебр Адзумайи	№ 2. С. 32–36
Янчевский В. И. О некоторых свойствах групп Уайтхеда и их унитарных аналогов алгебр Адзумайи над полями функций p -адических кривых и специальными гензелевыми полями	№ 3. С. 5–11

ФИЗИКА

- Апанасевич П. А., Дашкевич В. И., Тимофеева Г. И.** Сравнение лучевых нагрузок на торцы нелинейных кристаллов в ПГС с кольцевым резонатором № 2. С. 80–84
- 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 № 2. С. 76–79
- Батище С. А., Бушук С. Б., Кузьмук А. А., Савич А. В., Татур Г. А., Грабнер Г., Котэк В.** Самопоглощение излучения на длине волны 213 нм при лазерном воздействии на роговицу глаза № 1. С. 80–83
- Батище С. А., Бушук С. Б., Пилипенко В. А., Татур Г. А., Жигулин Д. В.** Образование частиц «черного» золота при лазерной абляции наносекундным излучением четвертой гармоники YAG:ND-лазера № 3. С. 96–101
- Веко О. В., Войнова Я. А., Овсюк Е. М.** Частица со спином 1/2 и аномальным магнитным моментом в кулоновском поле № 2. С. 48–56
- Гуртовой В. Г., Шелег А. У.** Изменение диэлектрических свойств монокристаллов $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ под действием электронного облучения № 4. С. 76–81
- Данильчик А. В., Войнилович А. Г., Ржеуцкий Н. В., Шпак П. В., Борущко В. В., Трофимов Ю. В., Цвирко В. И., Луценко Е. В., Яблонский Г. П.** Моделирование распределения температуры в матрице InGaN светодиодов с высокой плотностью мощности излучения № 1. С. 84–89
- Замковец А. Д., Понявина А. Н., Баран Л. В.** Плазмонный резонанс в планарных слоистых наноструктурах серебро-фталоцианин никеля № 4. С. 98–105
- Козленкова О. А., Плавская Л. Г., Микулич А. В., Леусенко И. А., Третьякова А. И., Плавский В. Ю.** Фотосенсибилизирующее действие билирубина на клетки животных в культуре № 1. С. 117–123
- Корза Е. В.** Усиление комбинационного рассеяния света неорганическими пигментами с использованием наночастиц золота и серебра № 1. С. 90–94
- Курочкин Ю. А.** Теоретико-групповая интерпретация орисфер трехмерного расширенного пространства Лобачевского № 3. С. 66–70
- Левчук Е. А., Макаренко Л. Ф.** Влияние магнитного поля на локализацию волновой функции электрона в системе нанозатвор–донор № 2. С. 68–75
- Маркевич В. Ю., Чулков Р. В.** Определение стационарного коэффициента ВКР-усиления калийгадолиниевого вольфрамата на длине волны 532 нм № 1. С. 102–106
- Покаташкин Г. С., Кокоулина Е. С., Шуляковский Р. Г.** Моделирование аномального рождения мягких фотонов на Нуклотроне № 3. С. 77–81
- Попов И. И., Щелчков А. В., Скрыпник А. Н., Зубков Н. Н., Жукова Ю. В., Черный А. Д., Сверчков С. А.** Численное и экспериментальное исследование гидравлического сопротивления труб с внутренним спиральным оребрением, нанесенным методом деформирующего резания № 4. С. 82–89
- Ропот А. П., Хило Н. А.** Генерация световых пучков Эйри при дифракции на синусоидальных фазовых решетках № 1. С. 95–101
- Русак Ю. А., Веко О. В., Овсюк Е. М.** Асимптотический анализ уравнений для спинорной частицы в поле Шварцшильда № 3. С. 71–76
- Русак А. А., Дашкевич В. И., Орлович В. А., Шкадаревич А. П.** Повышение выходной энергии ВКР-лазера путем повторного использования истощенной накачки № 3. С. 82–88
- Рыжевич А. А., Солоневич С. В., Хило Н. А., Балькин И. В.** Преобразование конических лазерных пучков в двусных кристаллах № 1. С. 107–116
- Савастенко Н. А., Филатова И. И., Люшкевич В. А., Чубрик Н. И., Габдуллин М. Т., Рамазанов Т. С., Абдуллин Х. А., Калкозова В. А.** Оптические и структурные свойства фотокатализаторов на основе ZnO № 2. С. 57–67
- Станчик А. В., Барайшук С. М., Башкиров С. А., Гременок В. Ф., Тиванов М. С., Дергачева М. Б., Уразов К. А.** Исследование тонких пленок $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ методом атомно-силовой микроскопии № 4. С. 67–75
- Толкачева Е. А., Холод О. Н., Мурын Л. И.** Особенности трансформации кислородосодержащих центров в кремнии при отжиге в интервале температур 450–700 °С: данные ИК-поглощения № 1. С. 124–128
- Шапошников В. Л., Кривошеева А. В., Борисенко В. Е.** Компьютерное моделирование энергетических зон и оптических параметров дихалькогенидов олова № 4. С. 90–97
- Шапошников В. Л., Кривошеева А. В., Борисенко В. Е.** Расчет электронных энергетических зон и оптических параметров сульфидов олова № 3. С. 89–95

ИНФОРМАТИКА

- Гущинский Н. Н., Баттайа О., Долгий А.** К оптимизации процессов последовательной обработки партий деталей № 4. С. 106–115
- Левин Г. М., Розин Б. М., Долгий А. Б.** Оптимизация выпуска и интенсивностей обработки группы деталей при нестационарном спросе № 3. С. 102–109

Поттосин Ю. В., Поттосина С. А. Поиск разреза графа в решении некоторых задач логического проектирования	№ 3. С. 110–118
Сергеев Р. С., Ковалев И. С. Поиск мутаций в геномных последовательностях <i>M. tuberculosis</i> , связанных с лекарственной устойчивостью.....	№ 2. С. 109–114
Соболевский П. И., Баханович С. В. Двухуровневый тайлинг и его применение при пространственно-временном отображении алгоритмов на параллельные архитектуры.....	№ 2. С. 85–97
Черемисинова Л. Д. Модели и алгоритмы оценивания среднего значения мощности, потребляемой последовательностными КМОП-схемами.....	№ 2. С. 98–108

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

Зверович Э. И. Два обобщения полигамма-функций.....	№ 2. С. 115–118
Юрчук Н. И., Новиков Е. Н. Необходимые условия для существования классических решений уравнения колебаний полугограниченной струны	№ 4. С. 116–120

УЧЕНЫЕ БЕЛАРУСИ

Абламейко Сергей Владимирович (К 60-летию со дня рождения)	№ 3. С. 119–120
Буракоў Віктар Сямёнавіч (Да 85-годдзя з дня нараджэння).....	№ 2. С. 119–122
Гайшун Иван Васильевич (К 70-летию со дня рождения)	№ 3. С. 121–123
Кириллова Фаина Михайловна (К юбилею)	№ 3. С. 124–125
Томильчик Лев Митрофанович (К 85-летию со дня рождения).....	№ 2. С. 123–128

**LIST OF PUBLICATIONS FOR 2016 IN “PROCEEDINGS OF THE NATIONAL
ACADEMY OF SCIENCES OF BELARUS. PHYSICS AND MATHEMATICS SERIES”**

MATHEMATICS

Amel'kin V. V., Vasilevich M. N. JWKB-method and construction of a differential system emerging in the Riemann – Hilbert problem	№ 1. P. 17–20
Astrovskii A. I. Uniform observability and observation systems in the Schwarz form	№ 1. P. 28–35
Beniash-Kryvets V. V., Govorushko I. O. Representation variety of Baumslag – Solitar groups in the case of not coprime exponents	№ 1. P. 52–56
Chymakov F. V., Vasilets S. I. First-kind integral equation with polar-logarithmic kernel	№ 2. P. 10–15
Chymakov F. V., Vasilets S. I. Solution of the first-kind one-type integral equation with the logarithmic kernel and mixed coefficients	№ 3. 47–50
Demenchuk A. K. Control problem of an asynchronous spectrum of quasiperiodic linear systems with a block representation of average coefficient matrix	№ 3. 12–15
Gaishun I. V., Goryachkin V. V. Robust and interval observability of two-dimensional discrete systems with interval coefficients	№ 2. P. 6–9
Grin A. A., Kuzmich A. V. Precise estimation of limit cycles numbers of autonomous systems with three equilibrium points in the plane	№ 4. P. 7–17
Kartynnik Y. A. Algorithmic properties of connected neighbourhood sets in graphs	№ 3. 30–37
Kayanovich S. S. Boundary-value problem for plug flow in the channel	№ 4. P. 55–66
Kharin A. Yu., Ton That Tu. Sequential statistical hypotheses testing on parameters of time series with a trend under missing values	№ 3. 38–46
Kharin Yu. S., Palukha U. Yu. Statistical estimates of Renyi and Tsallis entropy and their use for testing the hypotheses of “pure randomness”	№ 2. P. 37–47
Kharin Yu. S., Zhurak M. K. Asymptotic analysis of the maximum likelihood estimates of the parameters for a binomial conditionally autoregressive model of spatio-temporal data	№ 1. P. 36–45
Kirilyuk D. I. Self-returning criteria and centroids of polygons of n -ary groups	№ 3. 58–65
Korzyuk V. I. Problems of conjugation of the Poisson equations	№ 1. P. 5–16
Korzyuk V. I., Puzyrnyi S. I. Classical solution of mixed problems for the one-dimensional wave equation with Cauchy nonsmooth conditions	№ 2. P. 22–31
Korzyuk V. I., Nguyen Van Vinh. Classical solution of a problem with an integral condition for the one-dimensional biwave equation	№ 3. 16–29
Korzyuk V. I., Vinh N. V. Classical solutions of mixed problem for one-dimensional biwave equation	№ 1. P. 69–79
Le Minh Hieu. Unconditionally monotone finite difference scheme of the second-order approximation on uniform grids for the Gamma equation	№ 4. P. 47–54
Lomovtsev F. E. Necessary and sufficient conditions for forced vibrations of a semibounded string with the first characteristic directional derivative in the unsteady boundary condition	№ 1. P. 21–27
Lomovtsev F. E., Yurchuk N. I. Initial boundary value problem for the non-strictly hyperbolic equation with mixed boundary conditions in a quadrant	№ 3. 51–57
Malyutin V. B. Evaluation of functional integrals using Sturm sequences	№ 4. P. 32–37
Mukha V. S. Symmetric approximation of vector statistical data by linear varieties	№ 4. P. 23–31
Sarvanov V. I., Yafimau A. V. Solving a two-machine blocking flowshop scheduling problem with due dates	№ 1. P. 57–68
Vo Thi Kim Tuyen. Monotone difference schemes for the Schnackenberg model	№ 4. P. 38–46
Vorob'ev N. N., Kuznetsova A. R. On inductive lattices of saturated formations	№ 4. P. 18–22
Yanchevskii V. I. Some properties of Whitehead groups and their unitary analogs of Azumaya algebras over function fields of the p -adic curves and over special Henselian ones	№ 3. P. 5–11
Yanchevskii V. I. Whitehead groups, reduced norms and cyclicity of some special Azumaya algebras	№ 2. P. 32–36
Yanovich L. A., Gulo I. N. Calculation of moments of stochastic processes defined by trigonometric functions of Brownian motion	№ 2. P. 16–21
Zhuk E. E. Statistical determination of the nearest stationary time series in a space of autoregressive coefficients	№ 1. P. 46–51

PHYSICS

Apanasevic P. A., Dashkevich V. I., Timofeeva G. I. Comparison of beam loads on end face of non-linear crystals in ring cavity opo	№ 2. P. 80–84
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.....	№ 2. P. 76–79
Batishche S. A., Bushuk S. B., Kouzmouk A. A., Savitch A. V., Tatur H. A., Grabner G., Kautek W. Influence of self-absorption of 213 nm radiation on laser treatment of cornea	№ 1. P. 80–83
Batishche S. A., Bushuk S. B., Pilipenko V. A., Tatur H. A., Zhygulin D. V. Formation of “black” gold particles at nanosecond YAG:ND laser forth harmonic (266 nm) ablation	№ 3. 96–101
Danilchik A. V., Vainilovich A. G., Rzheutski M. V., Shpak P. V., Borushko V. V., Trofimov Y. V., Tsvirko V. I., Lutsenko E. V., Yablonskii G. P. Simulation of temperature distribution in the InGaN led matrix with high density of radiation power	№ 1. P. 84–89
Hurtavy V. G., Sheleg A. U. Change in the $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ single crystals dielectric properties induced by electron irradiation	№ 4. P. 76–81
Korza E. V. Light Raman scattering enhancement by inorganic pigments with the use of gold and silver nanoparticles	№ 1. P. 90–94
Kozlenkova O. A., Plavskaya L. G., Mikulich A. V., Leusenko I. A., Tretyakova A. I., Plavskii V. Yu. Photosensitizing effects of bilirubin on animal cells in culture	№ 1. P. 117–123
Kurochkin Yu. A. Group-theoretical interpretation of the horospheres of the three-dimensional extended Lobachevsky space	№ 3. 66–70
Levchuk E. A., Makarenko L. F. Effect of a magnetic field on the electron wave function relocation in the nanogate – donor system.....	№ 2. P. 68–75
Markevich V. U., Chulkov R. V. Determination of the steady-state Raman gain coefficients of potassium-gadolinium tungstate at a wavelength of 532 nm	№ 1. P. 102–106
Pokatashkin G. S., Kokoulina E. S., Shulyakovsky R. G. Simulation of the abnormal birth of soft photons on the Nuclotron	№ 3. 77–81
Popov I. A., Shchelchko A. V., Skrypnyk A. N., Zubkov N. N., Zhukova Yu. V., Chorny A. D., Sverchkov S. A. Numerical and experimental study of hydraulic resistance of tubes with internal helical finning by deforming cutting	№ 4. P. 82–89
Ropot A. I., Khilo N. A. Generation of Airy light beams diffracted by a sinusoidal phase grating	№ 1. P. 95–101
Rusak A. A., Dashkevich U. I., Orlovich, V. A., Shkadarevich A. P. Increasing the output energy of the Raman laser by a repeated use of a depleted pump	№ 3. 82–88
Rusak Y. A., Veko O. V., Ovsyuk E. M. Asymptotical analysis of the equations for the spinor particle in the Schwarzschild field	№ 3. 71–76
Ryzhevich A. A., Solonevich S. V., Khilo N. A., Balykin I. V. Transformation of conical laser beams in biaxial crystals	№ 1. P. 107–116
Savastenko N. A., Filatova I. I., Lyushkevich V. A., Chubrik N. I., Gabdullin M. T., Ramasanov T. S., Abdullin Kh. A., Kalkosova V. A. Optical and structural properties of ZnO-based photocatalysts	№ 2. P. 57–67
Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E. Calculation of electron energy bands and optical parameters of tin sulfides	№ 3. 89–95
Shaposhnikov V. L., Krivosheeva A. V., Borisenko V. E. Computer simulation of energetic bands and optical parameters of tin dichalcogenides	№ 4. P. 90–97
Stanchik A. V., Barajshuk S. M., Bashkirov S. A., Gremenok V. F., Tivanov M. S., Dergacheva M. B., Urazov K. A. Investigation of $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$ thin films by atomic force microscopy	№ 4. P. 67–75
Tolkacheva E. A., Kholad V. N., Murin L. I. Transformation peculiarities of oxygen-containing centers in silicon upon annealing in the temperature range 450–700 °C : IR absorption studies	№ 1. P. 124–128
Veko O. V., Voynova Y. A., Ovsyuk E. M. Spin 1/2 particle with anomalous magnetic moment in the Coulomb field	№ 2. P. 48–56
Zamkovets D., Ponyavina A. N., Baran L. V. Plasmon resonanse in the planar layered silver-nickel phthalocyanine nanostructures	№ 4. P. 98–105

INFORMATICS

Cheremisina L. D. Models and algorithms for estimation of average power consumed by sequential CMOS circuits.....	№ 2. P. 98–108
Guschinsky N. N., Battaia O., Dolgui A. On optimization of processes for sequential batch machining	№ 4. P. 106–115
Levin G. M., Rozin B. M., Dolgui A. B. Optimizing the output and the intensities of processing a batch of parts under non-stationary demand	№ 3. 102–109
Pottosin Yu. V., Pottosina S. A. Search of a cut in a graph used in logical design	№ 3. 110–118

- Sergeev R. S., Kavaliou I. S.** Search for drug-resistance mutations in *M. tuberculosis* genome sequences № 2. P. 109–114
- Sobolevsky P. I., Bakhanovich S. V.** Two-level tiling and its application in the space-time mapping of algorithms onto parallel architectures № 2. P. 85–97

SHORT COMMUNICATIONS

- Yurchuk N. I., Novikov E. N.** Necessary conditions for existence of classical solutions to the equation of semi-bounded string vibration № 4. P. 116–120
- Zverovich E. I.** Two generalizations of polygamma-functions № 2. P. 115–118

SCIENTISTS OF BELARUS

- Ablameiko Sergey Vladimirovich** (To the 60th Anniversary) № 3. 119–120
- Burakov Viktor Semenovich** (85th anniversary of the birth)..... № 2. P. 119–122
- Gaishun Ivan Vasilievich** (To the 70th Anniversary) № 3. 121–123
- Kirillova Faina Mikhailovna** (To the Anniversary) № 3. 124–125
- Tomilchik Lev Mitrofanovich** (85th anniversary of the birth)..... № 2. P. 123–128

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) приводятся *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 подрисунковые 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://elsevierscience.ru/files/kirilova_editorial.pdf).

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, флэшке 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 поддерживается. Вставку символов выпол-

нять через меню «Вставка\Символ». Выключку вверх и вниз (C^2 , C_4) 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 размером 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 переработанная 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 76 52 (среда); +375 17 284 19 19 (четверг, пятница), либо по электронной почте: fmvesti@mail.ru. либо через онлайн-форму на сайте.