

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ  
ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 4 (16)

2010

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

<i>Алехина М. А., Клянчина Д. М.</i> Об асимптотически оптимальных по надежности схемах в некоторых специальных базисах .....	3
<i>Коломыцева Е. А.</i> Существование обобщенных втулочных связей, совместимых с ARG-деформациями поверхностей в римановом пространстве.....	14
<i>Грабовская С. М.</i> О надежности неветвящихся программ в базисе, содержащем функцию вида $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ .....	26
<i>Голованов А. И., Сагдатуллин М. К.</i> Нелинейная задача о гиперупругом деформировании полилинейного конечного элемента оболочки средней толщины.....	39
<i>Бондаренко Л. Н., Шаранова М. Л.</i> Параметрические комбинаторные задачи и методы их исследования .....	50
<i>Новиков Е. А.</i> Численное моделирование пиролиза этана явным методом третьего порядка точности .....	64
<i>Гришина Е. Е., Деревянчук Е. Д., Медведек М. Ю., Смирнов Ю. Г.</i> Численное и аналитическое решение задачи дифракции электромагнитного поля на двух секциях с разной диэлектрической проницаемостью, расположенных в прямоугольном волноводе.....	73
<i>Медведек М. Ю.</i> Субиерархический метод решения интегрального уравнения Липпмана – Швингера.....	82
<i>Валовик Д. В., Смирнов Ю. Г.</i> Метод коллокации для решения уравнения электрического поля.....	89
<i>Бойков И. В., Кравченко М. В.</i> Приближенные методы глобального гармонического сферического анализа потенциальных полей.....	101

ФИЗИКА

<i>Карпунин В. В., Маргулис В. А.</i> Резонансное поглощение электромагнитного излучения в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем.....	111
<i>Журавлев В. М., Летуновский С. В.</i> Анализ долговременной эволюции активности солнца на основе ряда чисел Вольфа (I. Методика) .....	120

<b>Голованов О. А., Макеева Г. С., Николенко А. С., Чиркина М. А.</b> Электродинамический анализ зон пропускания и запрещенных зон в спектре оптического фильтра на основе фотонного кристалла .....	131
<b>Доломатов М. Ю., Леонов В. В.</b> Взаимосвязь энергии активации вязкого течения ньютоновских углеводородных сред и интегральных характеристик их электронных спектров поглощения в видимой и УФ области .....	141
<b>Кревчик В. Д., Калинина А. В.</b> Влияние спиновых состояний локализованных электронов на спектры примесного магнитооптического поглощения в квазиульмерной структуре .....	150
<b>Кревчик В. Д., Левашов А. В.</b> Особенности молекулярных состояний $A^+$ -центров в 2D-структурах .....	165

## ОБ АСИМПТОТИЧЕСКИ ОПТИМАЛЬНЫХ ПО НАДЕЖНОСТИ СХЕМАХ В НЕКОТОРЫХ СПЕЦИАЛЬНЫХ БАЗИСАХ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Рассматривается реализация булевых функций схемами из ненадежных функциональных элементов в полном конечном базисе  $B$ , содержащем специальные функции. Предполагается, что все элементы схемы независимо друг от друга с вероятностью  $\varepsilon \in (0, 1/2)$  подвержены неисправностям типа 0 на выходах. Доказано, что почти для всех булевых функций асимптотически оптимальные по надежности схемы функционируют с ненадежностью, асимптотически равной  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Эта оценка ненадежности в два раза меньше, чем в случае инверсных неисправностей на выходах элементов в соответствующих базисах.

*Ключевые слова:* булевы функции, функциональные элементы, асимптотически оптимальный, надежность.

*Abstract.* An article examines an implementation of the Boolean functions in the circuits with unreliable functional elements in complete finite  $B$  basic sets, containing special functions. It is assumed that all the circuit elements irrespective of each other are subject to 0 type failures at the outputs with the probability  $\varepsilon \in (0, 1/2)$ . The article proves that the circuits with asymptotically optimum reliability implement Boolean functions with the value of unreliability being equal  $\varepsilon$  when  $\varepsilon \rightarrow 0$ . The present value of unreliability is twice lower in comparison with inverse failures at the outputs of the relevant basic sets' elements.

*Keywords:* Boolean functions, functional elements, asymptotically optimum reliability.

### Введение

Введем множества булевых функций:

$$M_1 = \{ \bar{x}_1(x_2 \vee x_3), \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee x_3), \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee \bar{x}_3), \bar{x}_1 \vee x_2x_3, \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2x_3, \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2\bar{x}_3 \};$$

$$M_2 = \{ (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3), (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3),$$

$$(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee x_3), (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3) \& (\bar{x}_1 \vee x_2 \vee x_3) \& \& (x_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3),$$

$$(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)(\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)(x_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3) \}; M_3 = \{ (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3) \}.$$

Рассмотрим реализацию булевых функций схемами из ненадежных функциональных элементов [1] в полном конечном базисе  $B$ , содержащем некоторую функцию из множества  $M = M_1 \cap M_2 \cap M_3$ . Считаем, что схема реали-

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РГНФ, номер проекта 09-06-28615a/B.

зует функцию  $f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ , если при поступлении на входы схемы набора  $\tilde{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$  при отсутствии неисправностей на выходе схемы появляется значение  $f(\tilde{a})$ . Допустим, что все элементы схемы независимо друг от друга с вероятностью  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \in (0, 1/2)$ ) переходят в неисправные состояния типа 0 на выходах. Эти неисправности характеризуются тем, что в исправном состоянии функциональный элемент реализует приписанную ему булеву функцию, а в неисправном – константу 0.

Пусть  $P_{f(\tilde{a})}(S, \tilde{a})$  – вероятность появления  $\overline{f(\tilde{a})}$  на выходе схемы  $S$ , реализующей булеву функцию  $f(\tilde{x})$ , при входном наборе  $\tilde{a}$ . Ненадежность  $P(S)$  схемы  $S$  определяется как максимальное из чисел  $P_{f(\tilde{a})}(S, \tilde{a})$  при всевозможных входных наборах  $\tilde{a}$ . Надежность схемы  $S$  равна  $(1 - P(S))$ .

Пусть  $P_\varepsilon(f) = \inf P(S)$ , где  $S$  – схема из ненадежных элементов, реализующая булеву функцию  $f$ . Схему  $A$  из ненадежных элементов, реализующую булеву функцию  $f$ , назовем асимптотически оптимальной по надежности, если  $P(A) \sim P_\varepsilon(f)$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , т.е.  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{P(A)}{P_\varepsilon(f)} = 1$ .

Пусть  $B_3$  – множество всех булевых функций, зависящих от трех переменных  $x_1, x_2, x_3$ .

В работе [2] введены множества функций  $G_1, G_2, G_3, G_4$ , где  $G_1$  – множество функций, конгруэнтных функциям  $x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_1^{\sigma_1} x_3^{\sigma_3} \vee x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3}$ ;  $G_2$  – множество булевых функций, зависящих от переменных  $x_1, x_2, x_3$  и конгруэнтных функциям  $x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \oplus x_3^{\sigma_3}, \sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3\}$ ;  $G_3$  – множество функций, конгруэнтных функциям  $x_1^{\sigma_1} x_2^{\bar{\sigma}_2} \vee x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3}, \sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3\}$ ;  $G_4$  – множество функций, зависящих от переменных  $x_1, x_2, x_3, x_4$  и конгруэнтных функциям  $x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_3^{\sigma_3} x_4^{\sigma_4}$  или  $(x_1^{\sigma_1} \vee x_2^{\sigma_2})(x_3^{\sigma_3} \vee x_4^{\sigma_4})$ , где  $\sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3, 4\}$ .

Обозначим  $G = G_1 \cap G_2 \cap G_3$  ( $|G| = 56$ ). В случае инверсных неисправностей на выходах элементов доказано [2], что если полный конечный базис  $B$  содержит некоторую функцию множества  $G$ , то любую функцию  $f$  в этом базисе  $B$  можно реализовать схемой  $A$  с ненадежностью  $P(A) \leq \varepsilon + 200\varepsilon^2$  при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . Последнее утверждение верно и в случае неисправностей типа 0 на выходах элементов [3–5]. Учитывая, что при неисправностях типа 0 на выходах элементов любая схема, содержащая хотя бы один функциональный элемент и реализующая отличную от константы 0 функцию, имеет ненадежность не менее  $\varepsilon$  [3], получаем следующий результат: если полный конечный базис  $B$  содержит некоторую функцию множества  $G$ , то для почти всех функций асимптотически оптимальные по надежности схемы функционируют с ненадежностью, асимптотически равной  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Это свойство базиса будем называть  $\varepsilon$ -свойством.

Множество  $G$  является критериальным (исчерпывающим) [2], если базис  $B$  содержит только функции трех переменных, т.е.  $B \subseteq B_3$ , а его элементы подвержены инверсным неисправностям на выходах. В работе [6] доказано,

что функции множества  $G$  не являются исчерпывающими, если базис  $B \subseteq B_3$ , а базисные элементы подвержены неисправностям типа 0 на выходах. В работе [6] найдено такое множество  $M^*$  функций трех переменных, что если полный конечный базис  $B$  содержит некоторую функцию множества  $M^*$ , то базис  $B$  обладает  $\varepsilon$ -свойством. Ответ на вопрос «Является ли множество  $M^* \cap G$  исчерпывающим, если полный конечный базис  $B \subseteq B_3$ , а его элементы подвержены неисправностям типа 0 на выходах?» получен в этой работе. Ответ отрицательный, далее будет доказано, что множество  $G$  не является исчерпывающим в случае неисправностей типа 0 на выходах элементов и  $B \subseteq B_3$ .

Функции множества  $M$  исследовал А. В. Васин [7]. Для инверсных неисправностей на выходах элементов он доказал, что:

1) если полный конечный базис  $B$  содержит некоторую функцию множества  $M$ , то любую функцию  $f$  в этом базисе можно реализовать схемой  $A$  с ненадежностью  $P(A) \leq 2\varepsilon + 204\varepsilon^2$  при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ ;

2) если базис  $B \subseteq B_3 \setminus G$  и  $B \cup M \neq \emptyset$ , то в базисе  $B$  почти для всех функций асимптотически оптимальные по надежности схемы функционируют с ненадежностью, асимптотически равной  $2\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Эта асимптотическая оценка ненадежности в два раза хуже аналогичной оценки при неисправностях типа 0 на выходах элементов, полученной в этой работе.

### Вспомогательные ранее известные результаты

Обозначим через  $f^\sigma$  функцию  $f$ , если  $\sigma=1$ , и функцию  $\bar{f}$ , если  $\sigma=0$ , а схему, реализующую функцию  $f^\sigma$  ( $\sigma \in \{0,1\}$ ), будем обозначать  $S^\sigma$ .

Пусть схема  $S_g$  реализует функцию  $g \in G_4$  (напомним, что  $g = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_3^{\sigma_3} x_4^{\sigma_4}$ , или  $g = (x_1^{\sigma_1} \vee x_2^{\sigma_2})(x_3^{\sigma_3} \vee x_4^{\sigma_4})$ ,  $\sigma_i \in \{0,1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ ). Возьмем схему  $S^{\sigma_1}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_1}$ , схему  $S^{\sigma_2}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_2}$ , схему  $S^{\sigma_3}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_3}$ , и схему  $S^{\sigma_4}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_4}$ . Используя схемы  $S_g$ ,  $S^{\sigma_1}$ ,  $S^{\sigma_2}$ ,  $S^{\sigma_3}$  и  $S^{\sigma_4}$ , построим схему (рис. 1), которую также обозначим  $\Phi(S^1, S^0)$ . Нетрудно проверить, что и в этом случае схема  $\Phi(S^1, S^0)$  реализует функцию  $f$ . Всюду далее схему  $S^1$  будем обозначать  $S$ .

Пусть схема  $S_g$  реализует функцию  $g \in G_1$  (т.е. функция  $g$  имеет вид  $g = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_1^{\sigma_1} x_3^{\sigma_3} \vee x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3}$ ,  $\sigma_i \in \{0,1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ ). Возьмем схему  $S^{\sigma_1}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_1}$ , схему  $S^{\sigma_2}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_2}$ , и схему  $S^{\sigma_3}$ , реализующую функцию  $f^{\sigma_3}$ . Используя схемы  $S_g$ ,  $S^{\sigma_1}$ ,  $S^{\sigma_2}$  и  $S^{\sigma_3}$ , построим схему  $\Phi(S^0, S^1)$  (рис. 2). Нетрудно проверить, что схема  $\Phi(S^0, S^1)$  реализует функцию  $f$ .

Операция  $\Phi$  (рис. 1, 2) по схемам  $S$  и  $S^0$ , реализующим булевы функции  $f$  и  $\bar{f}$  соответственно, строит схему  $\Phi(S, S^0)$ , реализующую функцию  $f$ . Результат  $n$ -кратного применения ( $n \in \mathbb{N}$ ) операции  $\Phi$  к схемам  $S$  и  $S^0$  будем обозначать  $\Phi^n(S, S^0)$ . Применение операции  $\Phi$  к некоторым схемам  $S$  и  $S^0$  при некоторых условиях на их ненадежности  $P(S)$  и  $P(S^0)$  приводит к схемам,

имеющим более высокую надежность, чем исходная схема  $S$ . В том случае, когда операция  $\Phi$  применяется только к схемам  $S$  (т.е. когда все числа  $\sigma_i = 1$ ), результат ее применения будем обозначать  $\Phi(S)$ . Если же операция  $\Phi$  применяется только к схемам  $S^0$  (т.е. когда все числа  $\sigma_i = 0$ ), результат ее применения будем обозначать  $\Phi(S^0)$ .

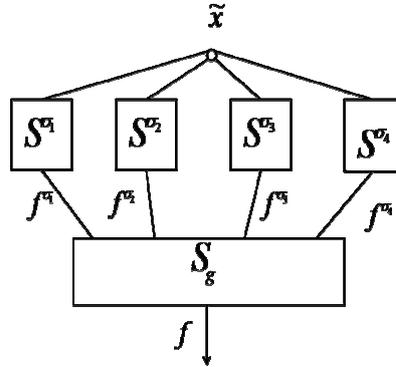


Рис. 1

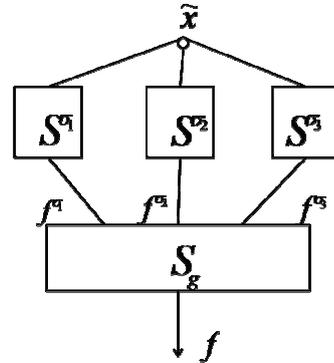


Рис. 2

**Лемма 1** [3]. Допустим, что произвольную функцию  $f$  можно реализовать схемой  $S$  с надежностью не больше  $p$  ( $p \leq 1/2$ ). Пусть  $S_g$  – схема, реализующая функцию  $g \in G_1 \cup G_4$  с надежностью  $P(S_g)$  ( $P(S_g) \leq 1/2$ ), причем  $v_0$  и  $v_1$  – вероятности ошибок схемы  $S_g$  на наборах  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$  и  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4)$  соответственно, если  $g$  зависит от четырех переменных, и на наборах  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$  и  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3)$  соответственно, если  $g$  зависит от трех переменных. Тогда схема  $\Phi(S, S^0)$  реализует функцию  $f$  с надежностью

$$P(\Phi(S, S^0)) \leq \max\{v_0, v_1\} + 4p \cdot P(S_g) + 6p^2, \text{ если } g \in G_4 \text{ (рис. 1),}$$

и

$$P(\Phi(S, S^0)) \leq \max\{v_0, v_1\} + 3p \cdot P(S_g) + 3p^2, \text{ если } g \in G_1 \text{ (рис. 2).}$$

**Лемма 2** [8]. В произвольном полном конечном базисе  $B$  любую булеву функцию  $f$  можно реализовать такой схемой  $S$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  ее надежность  $P(S) \leq 5,2\varepsilon$ .

**Лемма 3** [6]. Пусть схема  $S_h$  реализует функцию  $h(x_1, x_2, x_3) = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \oplus x_3^{\sigma_3}$ ,  $\sigma_i \in \{0, 1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$  с надежностью  $P(S_h)$ , причем  $w_0, w_1$  – вероятности ошибок схемы  $S_h$  на наборах  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0)$ ,  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1)$ . Тогда можно построить такую схему  $S_g$ , реализующую функцию  $g(x_1, x_2, x_3) = (x_1 x_2 \vee x_1 x_3 \vee x_2 x_3)^{\sigma_3}$ , что  $P(S_g) \leq P(S_h) + 2 p_{\oplus}$  ( $p_{\oplus}$  – максимальная из надежностей схем, реализующих функции  $x_1 \oplus x_2$  и  $x_1 \oplus x_2 \oplus 1$  в рассматриваемом базисе), а для вероятностей ошибок  $v_1$  и  $v_0$  схемы  $S_g$  на наборах  $(0, 0, 0)$  и  $(1, 1, 1)$  выполняются неравенства:  $v_1, v_0 \leq \max\{w_0, w_1\} + 2 p_{\oplus}^2$ .

### Основные результаты

**Лемма 4.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_1 \cup B$ , тогда в базисе  $B$  функцию  $g \in G_4$  можно реализовать такой схемой  $S_g$ , что при  $\varepsilon \in (0; 1/2)$  ее ненадежность  $P(S_g) \leq 2\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $\nu_0$  и  $\nu_1$  схемы  $S_g$  на наборах  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$  и  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4)$  соответственно удовлетворяют неравенствам  $\nu_0 \leq \varepsilon$  и  $\nu_1 \leq \varepsilon$ .

**Доказательство.** Пусть базис  $B$  содержит функцию из множества  $M_1$ . Возможны следующие варианты:

1.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  и  $x_3$  получим функцию  $\phi_1 = \bar{z}_1 \bar{z}_2$ . Тогда  $g = \varphi(\phi_1(z_1, z_2), x_2, x_3) = (z_1 \vee z_2)(\bar{x}_2 \vee \bar{x}_3) \in G_4$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ ,  $\sigma_4 = 0$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 1, 0, 0)$  и получим  $\nu_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 0, 1, 1)$  и получим  $\nu_1 = 0$ .

2.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1(x_2 \vee x_3)$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  и  $x_3$  получим функцию  $\phi_1 = \bar{z}_1 z_2$ . Тогда  $g = \varphi(\phi_1(z_1, z_2), x_2, x_3) = (z_1 \vee z_2)(\bar{x}_2 \vee x_3) \in G_4$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ ,  $\sigma_4 = 1$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 1, 0, 1)$  и получим  $\nu_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 0, 1, 0)$  и получим  $\nu_1 = 0$ .

3.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee x_3)$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и  $x_3$ , подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  получим функцию  $\phi_2 = \bar{z}_1 \bar{z}_2$ . Тогда  $g = \varphi(\phi_2(z_1, z_2), x_2, x_3) = (z_1 \vee z_2)(\bar{x}_2 \vee x_3)$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ ,  $\sigma_4 = 1$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 1, 0, 1)$  и получим  $\nu_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $\nu_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 0, 1, 0)$  и получим  $\nu_1 = 0$ .

Функция  $\bar{x}_1(x_2 \vee \bar{x}_3)$  конгруэнтна функции  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee x_3)$ , рассмотренной в п. 3, следовательно, для нее утверждение леммы верно.

4.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \bar{x}_3$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  и  $x_3$  получим  $\phi_1 = \bar{z}_1 \vee \bar{z}_2$ . Тогда

$g = \varphi(\phi_1(z_1, z_2), x_2, x_3) = z_1 z_2 \vee \bar{x}_2 \bar{x}_3 \in G_4$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ ,  $\sigma_4 = 0$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 1, 0, 0)$  и получим  $v_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 0, 1, 1)$  и получим  $v_1 = \varepsilon$ .

5.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 \vee x_2 x_3$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  и  $x_3$  получим  $\phi_1 = \bar{z}_1 \vee z_2$ . Тогда  $g = \varphi(\phi_1(z_1, z_2), x_2, x_3) = z_1 \bar{z}_2 \vee x_2 x_3 \in G_4$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 0$ ,  $\sigma_3 = 1$ ,  $\sigma_4 = 1$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 0, 1, 1)$  и получим  $v_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 1, 0, 0)$  и получим  $v_1 = \varepsilon$ .

6.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 x_3$ , тогда из нее подстановкой  $z_1$  вместо  $x_1$  и  $x_3$ , подстановкой  $z_2$  вместо  $x_2$  получим функцию  $\phi_2 = \bar{z}_1 \vee \bar{z}_2$ . Тогда  $g = \varphi(\phi_2(z_1, z_2), x_2, x_3) = z_1 z_2 \vee \bar{x}_2 x_3 \in G_4$ , причем  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ ,  $\sigma_4 = 1$ . Схему из двух элементов, реализующую функцию  $g$ , обозначим  $S_g$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_0$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = (1, 1, 0, 1)$  и получим  $v_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_1$  на выходе схемы  $S_g$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4) = (0, 0, 1, 0)$  и получим  $v_1 = \varepsilon$ .

Отметим, что функция  $\bar{x}_1 \vee x_2 \bar{x}_3$  конгруэнтна функции  $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 x_3$ , рассмотренной в п. 6, следовательно, для нее утверждение леммы верно.

Лемма 4 доказана.

**Теорема 1.** Пусть полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $\varphi \in M_1$ . Тогда любую булеву функцию  $f$  в базисе  $B$  можно реализовать такой схемой  $A$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  верно неравенство  $P(A) \leq \varepsilon + 15\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_1 \cup B$ . По лемме 4 функцию  $g \in G_4$  (т.е.  $g = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_3^{\sigma_3} x_4^{\sigma_4}$  или  $g = (x_1^{\sigma_1} \vee x_2^{\sigma_2})(x_3^{\sigma_3} \vee x_4^{\sigma_4})$ ,  $\sigma_i \in \{0, 1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3, 4\}$ ) в базисе  $B$  можно реализовать такой схемой  $S_g$ , что  $P(S_g) \leq 2\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $v_0$  и  $v_1$  на наборах  $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$  и  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \bar{\sigma}_3, \bar{\sigma}_4)$  удовлетворяют неравенствам  $v_0 \leq \varepsilon$ ,  $v_1 \leq \varepsilon$ . Следовательно,  $\max\{v_0, v_1\} \leq \varepsilon$ .

Пусть  $f$  – произвольная булева функция. По лемме 2 функции  $f$  и  $\bar{f}$  можно так реализовать схемами  $S$  и  $S^0$  соответственно, что  $P(S) \leq 5,2\varepsilon$  и  $P(S^0) \leq 5,2\varepsilon$ . Используя схему  $S_g$ , а также схемы  $S^{\sigma_1}$ ,  $S^{\sigma_2}$ ,  $S^{\sigma_3}$  и  $S^{\sigma_4}$ , построим схему  $\Phi(S, S^0)$ , реализующую функцию  $f$  (рис. 1). По лемме 1 оценим

ненадежность построенной схемы  $\Phi(S, S^0)$ , полагая  $p = 5,2\varepsilon$ . Получаем неравенство

$$P(\Phi(S, S^0)) \leq \max\{v_0, v_1\} + 4p \cdot P(S_g) + 6p^2 \leq \varepsilon + 4 \cdot 5,2\varepsilon \cdot 2\varepsilon + 6 \cdot (5,2\varepsilon)^2 \leq \\ \leq \varepsilon + 204\varepsilon^2 \leq 1,3\varepsilon \text{ при } \varepsilon \in (0; 1/960].$$

По схеме  $\Phi(S, S^0)$  построим схему  $\Phi^2(S, S^0)$  и снова применим лемму 1 для оценки ненадежности схемы  $\Phi^2(S, S^0)$ , полагая  $p = 1,3\varepsilon$ . Получаем неравенство

$$P(\Phi^2(S, S^0)) \leq \max\{v_0, v_1\} + 4p \cdot P(S_g) + 6p^2 \leq \varepsilon + 4 \cdot 1,2\varepsilon \cdot 2\varepsilon + 6 \cdot (1,2\varepsilon)^2 \leq \\ \leq \varepsilon + 19\varepsilon^2 \leq 1,02\varepsilon \text{ при } \varepsilon \in (0; 1/960].$$

По схеме  $\Phi^2(S, S^0)$  построим схему  $\Phi^3(S, S^0)$  и по лемме 1 оценим ненадежность схемы  $\Phi^3(S, S^0)$ , полагая  $p = 1,02\varepsilon$ :

$$P(\Phi^3(S, S^0)) \leq \max\{v_0, v_1\} + 4p \cdot P(S_g) + 6p^2 \leq \\ \leq \varepsilon + 4 \cdot 1,02\varepsilon \cdot 2\varepsilon + 6 \cdot (1,02\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 15\varepsilon^2.$$

Схема  $\Phi^3(S, S^0) = A$  – искомая.

Теорема 1 доказана.

**Лемма 5.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_2 \cup B$ , тогда в базисе  $B$  функцию  $h \in G_2$  (т.е.  $h(x_1, x_2, x_3) = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \oplus x_3^{\sigma_3}$ ,  $\sigma_i \in \{0, 1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ ) можно реализовать такой схемой  $S_h$ , что  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $w_0, w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборах  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1)$ ,  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0)$  соответственно удовлетворяют неравенствам  $w_0 \leq \varepsilon$ ,  $w_1 \leq \varepsilon$ .

**Доказательство.** Проверим верность леммы для функций множества  $M_2$ .

1. Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)$ . Тогда  $h(x_1, x_2, x_3) = \varphi(\varphi(x_1, x_1, x_2), x_3, x_3) = x_1 \bar{x}_2 \oplus x_3$ , т.е.  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 0$ ,  $\sigma_3 = 1$ . Поскольку для реализации функции  $h$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_0$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1) = (0, 1, 1)$  и получим  $w_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0) = (0, 1, 0)$  и получим  $w_1 = 0$ .

2. Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)$ . Тогда  $h(x_1, x_2, x_3) = \varphi(\varphi(x_1, x_2, x_1), x_3, x_1) = x_1 x_2 \oplus \bar{x}_3$ , т.е.  $\sigma_1 = 1$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 0$ . Поскольку для реализации функции  $h$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_0$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1) = (0, 0, 1)$  и получим  $w_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0) = (0, 0, 0)$  и получим  $w_1 = \varepsilon$ .

3. Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee x_3)$ . Тогда  $h(x_1, x_2, x_3) = \varphi(\varphi(x_1, x_1, x_2), x_3, x_3) = \bar{x}_1 x_2 \oplus x_3$ , т.е.  $\sigma_1 = 0$ ,  $\sigma_2 = 1$ ,  $\sigma_3 = 1$ . Поскольку для реализации функции  $h$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_0$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1) = (1, 0, 1)$  и получим  $w_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0) = (1, 0, 0)$  и получим  $w_1 = 0$ .

4. Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)(\bar{x}_1 \vee x_2 \vee x_3)(x_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)$ . Тогда  $h(x_1, x_2, x_3) = \varphi(\varphi(x_1, x_1, x_2), x_1, x_3) = x_1 \bar{x}_2 \oplus x_3$ , т.е.  $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 0, \sigma_3 = 1$ . Поскольку для реализации функции  $h$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_0$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1) = (0, 1, 1)$  и получим  $w_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0) = (0, 1, 0)$  и получим  $w_1 = \varepsilon$ .

5. Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)(\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)(x_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)$ . Тогда  $h(x_1, x_2, x_3) = \varphi(\varphi(x_1, x_1, x_2), x_1, x_3) = x_1 x_2 \oplus \bar{x}_3$ , т.е.  $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 0$ . Поскольку для реализации функции  $h$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_0$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1) = (0, 0, 1)$  и получим  $w_0 = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборе  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0) = (0, 0, 0)$  и получим  $w_1 = \varepsilon$ .

Лемма 5 доказана.

**Теорема 2.** Пусть полный базис  $B$  содержит функцию  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_2$ . Тогда любую булеву функцию  $f$  в базисе  $B$  можно реализовать схемой  $A$  так, что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  верно неравенство  $P(A) \leq \varepsilon + 100\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_2 \cup B$ . Применима лемма 5, согласно которой в базисе  $B$  некоторую функцию  $h \in G_2$ , т.е. функцию вида  $h(x_1, x_2, x_3) = x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \oplus x_3^{\sigma_3}$ ,  $\sigma_i \in \{0, 1\}$ ,  $i \in \{1, 2, 3\}$ , можно реализовать такой схемой  $S_h$ , что  $P(S_h) \leq 2\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $w_0, w_1$  на выходе схемы  $S_h$  на наборах  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 1)$ ,  $(\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, 0)$  соответственно удовлетворяют неравенствам  $w_0 \leq \varepsilon, w_1 \leq \varepsilon$ .

По лемме 2 функции  $x_1 \oplus x_2$  и  $x_1 \oplus x_2 \oplus 1$  можно реализовать схемами  $S_1$  и  $S_2$  соответственно так, что  $P(S_1) \leq 5,2\varepsilon$  и  $P(S_2) \leq 5,2\varepsilon$ . Следовательно,  $p_{\oplus} = \max\{P(S_1), P(S_2)\} \leq 5,2\varepsilon$ .

По лемме 3, используя схему  $S_h$ , построим такую схему  $S_g$ , реализующую функцию  $g(x_1, x_2, x_3) = (x_1 x_2 \vee x_1 x_3 \vee x_2 x_3)^{\sigma_3}$ , что  $P(S_g) \leq P(S_h) + 2p_{\oplus} \leq 2\varepsilon + 2 \cdot 5,2\varepsilon \leq 12,4\varepsilon$ , а для вероятностей ошибок  $v_1$  и  $v_0$  схемы  $S_g$  на наборах  $(0, 0, 0)$  и  $(1, 1, 1)$  выполняются неравенства:  $v_1, v_0 \leq \max\{w_0, w_1\} + 2p_{\oplus}^2 \leq \varepsilon + 2(5,2\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ .

Пусть  $f$  – произвольная булева функция.

Если  $\sigma_3 = 1$ , то возьмем три экземпляра схемы  $S$ , реализующей функцию  $f$  с ненадежностью  $P(S) \leq 5,2\varepsilon$  (по лемме 2 это возможно), а также один экземпляр схемы  $S_g$  и построим схему  $\Phi(S)$  (рис. 2), реализующую функцию  $f$ . По лемме 1 оценим ненадежность построенной схемы  $\Phi(S)$ :  $P(\Phi(S)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 5,2\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (5,2\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 328,7\varepsilon^2 \leq 1,35\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi(S)$  построим схему  $\Phi^2(S)$ . Применим лемму 1 и получим:  $P(\Phi^2(S)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 1,35\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (1,35\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 110\varepsilon^2 \leq 1,115\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi^2(S)$  построим схему  $\Phi^3(S)$ . Применим лемму 1 и получим:  $P(\Phi^3(S)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 1,115\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (1,115\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 100\varepsilon^2$ . Схема  $\Phi^3(S) = A$  – искомая.

Если  $\sigma_3 = 0$ , то возьмем три экземпляра схемы  $S^0$ , реализующей функцию  $\bar{f}$  с ненадежностью  $P(S^0) \leq 5,2\varepsilon$  (по лемме 2 это возможно), а также

один экземпляр схемы  $S_g$  и построим схему  $\Phi(S^0)$  (рис. 2), реализующую функцию  $f$ . По лемме 1 оценим ненадежность построенной схемы  $\Phi(S^0)$ :  $P(\Phi(S^0)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 5,2\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (5,2\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 328,7\varepsilon^2 \leq 1,35\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi(S^0)$  построим схему  $\Phi^2(S^0)$ . Применим лемму 1 и получим:  $P(\Phi^2(S^0)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 1,35\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (1,35\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 110\varepsilon^2 \leq 1,115\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi^2(S^0)$  построим схему  $\Phi^3(S^0)$ . Применим лемму 1 и получим:  $P(\Phi^3(S^0)) \leq \varepsilon + 54,1\varepsilon^2 + 3 \cdot 1,115\varepsilon \cdot 12,4\varepsilon + 3 \cdot (1,115\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 100\varepsilon^2$ . Схема  $\Phi^3(S^0) = A$  – искомая.

Теорема 2 доказана.

**Лемма 6.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)$  (т.е.  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_3$ ), содержится в базисе  $B$ , тогда в базисе  $B$  можно построить такую схему  $S_g$ , реализующую функцию  $g(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2 \vee x_1 x_3 \vee x_2 x_3$ , что  $P(S_g) \leq 4\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $v_1$  и  $v_0$  схемы  $S_g$  на наборах  $(0,0,0)$  и  $(1,1,1)$  равны:  $v_1 = 0, v_0 = \varepsilon$ .

**Доказательство.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)$  содержится в базисе  $B$ . Тогда функция  $\varphi(\varphi(x_2, x_3, x_2), x_2, x_1) = x_1 \bar{x}_2 \vee x_2 x_3 = m(x_1, x_2, x_3) \in G_3$ , причем  $\sigma_1 = 1, \sigma_2 = 1, \sigma_3 = 1$ . Поскольку для реализации функции  $m$  двух элементов достаточно, верно неравенство  $P(S_m) \leq 2\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $P_0(S_m, (1,1,1))$  схемы  $S_m$  на наборе  $(1,1,1)$  и получим  $P_0(S_m, (1,1,1)) = \varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $P_1(S_m, (0,0,0))$  схемы  $S_m$  на наборе  $(0,0,0)$  и получим  $P_1(S_m, (0,0,0)) = 0$ .

Моделируя формулу  $m(x_1, m(x_1, x_2, x_3), x_3)$ , построим схему  $S_g$ , состоящую из четырех элементов и реализующую функцию  $g(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2 \vee x_1 x_3 \vee x_2 x_3$ . Тогда  $P(S_g) \leq 4\varepsilon$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_1$  схемы  $S_g$  на наборе  $(0,0,0)$  и получим  $v_1 = 0$ . Вычислим вероятность ошибки  $v_0$  схемы  $S_g$  на наборе  $(1,1,1)$  и получим  $v_0 = \varepsilon$ .

Лемма 6 доказана.

**Теорема 3.** Пусть полный базис  $B$  содержит функцию  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M_3$ . Тогда любую булеву функцию  $f$  в базисе  $B$  можно реализовать схемой  $A$  так, что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  верно неравенство  $P(A) \leq \varepsilon + 16\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть  $\varphi(x_1, x_2, x_3) = (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3) \in M_3 \cup B$ .

Тогда по лемме 6 функцию  $g(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2 \vee x_1 x_3 \vee x_2 x_3$  можно реализовать такой схемой  $S_g$ , что  $P(S_g) \leq 4\varepsilon$ , а вероятности ошибок  $v_1$  и  $v_0$  схемы  $S_g$  на наборах  $(0,0,0)$  и  $(1,1,1)$  соответственно равны  $v_1 = 0, v_0 = \varepsilon$ .

Пусть  $f$  – произвольная булева функция. Возьмем три экземпляра схемы  $S$ , реализующей функцию  $f$  с ненадежностью  $P(S) \leq 5,2\varepsilon$  (по лемме 2 это возможно), а также один экземпляр схемы  $S_g$  и построим схему  $\Phi(S)$  (рис. 2), реализующую функцию  $f$ . По лемме 1 оценим ненадежность построенной схемы  $\Phi(S)$ :  $P(\Phi(S)) \leq \varepsilon + 3 \cdot 4\varepsilon \cdot 5,2\varepsilon + 3 \cdot (5,2\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 143,5\varepsilon^2 \leq 1,2\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi(S)$  построим схему  $\Phi^2(S)$ . По лемме 1 оценим ненадежность схемы  $\Phi^2(S)$  и получим  $P(\Phi^2(S)) \leq \varepsilon + 3 \cdot 4\varepsilon \cdot 1,2\varepsilon + 3 \cdot (1,2\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 18,72\varepsilon^2 \leq 1,2\varepsilon$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . По схеме  $\Phi^2(S)$  построим схему  $\Phi^3(S)$ .

По лемме 1 оценим ненадежность схемы  $\Phi^3(S)$  и получим  $P(\Phi^3(S)) \leq \varepsilon + 3 \cdot 4\varepsilon \cdot 1,02\varepsilon + 3 \cdot (1,02\varepsilon)^2 \leq \varepsilon + 16\varepsilon^2$ . Схема  $\Phi^3(S) = A$  – искомая.

Теорема 3 доказана.

### Выводы

1. Если полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $\varphi(x_1, x_2, x_3) \in M$ , то любую булеву функцию  $f$  в базисе  $B$  можно реализовать схемой  $A$  так, что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  верно неравенство  $P(A) \leq \varepsilon + 100\varepsilon^2$ .

2. При неисправностях типа 0 на выходах элементов функции множества  $M$  обладают тем же свойством, что и функции множества  $M^* \cap G$ , т.е. наличие их в полном конечном базисе  $B$  гарантирует реализацию почти всех булевых функций асимптотически оптимальными по надежности схемами, функционирующими с ненадежностью, асимптотически равной  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

В заключение укажем известные [3–6] на момент написания статьи функции  $\varphi(x_1, x_2, x_3)$  такие, что если полный конечный базис содержит функцию  $\varphi$ , то он обладает  $\varepsilon$ -свойством.

Булевы функции  $f_1$  и  $f_2$  назовем конгруэнтными, если одна из них может быть получена из другой заменой переменных (без отождествления). Пусть  $X \subseteq B_3$ . Обозначим  $\text{Congr}(X)$  – множество всех функций, зависящих от переменных  $x_1, x_2, x_3$ , каждая из которых конгруэнтна некоторой функции множества  $X$ . Например,  $\text{Congr}\{1, x_1, x_1 \& x_2\} = \{1, x_1, x_2, x_3, x_1 \& x_2, x_2 \& x_3, x_1 \& x_3\}$ .

Обозначим  $G^* = G \cap \text{Congr}\{M^*\} \cap \text{Congr}\{M\}$ :

$$\begin{aligned} G^* = & G_1 \cap G_2 \cap G_3 \cup \text{Congr}\{x_1 x_2 \vee \bar{x}_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3, x_1 \bar{x}_2 \vee \bar{x}_1 x_2 \bar{x}_3, \bar{x}_1 x_2 \vee x_1 \bar{x}_2 x_3, \\ & \bar{x}_1 \bar{x}_2 \vee x_1 x_2 \bar{x}_3, \bar{x}_1 \bar{x}_2 x_3 \vee x_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3 \vee \bar{x}_1 x_2 \bar{x}_3, x_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3 \vee \bar{x}_1 \bar{x}_2 x_3 \vee x_1 x_2 x_3, \\ & \bar{x}_1 \bar{x}_2 \bar{x}_3 \vee x_1 x_2 x_3, \bar{x}_1 \bar{x}_2 x_3 \vee x_1 x_2 \bar{x}_3, \bar{x}_1(x_2 \vee x_3), \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee x_3), \\ & \bar{x}_1(\bar{x}_2 \vee \bar{x}_3), \bar{x}_1 \vee x_2 x_3, \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 x_3, \bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \bar{x}_3, (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3), \\ & (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3), (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2)(x_1 \vee x_2 \vee x_3), \\ & (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)(\bar{x}_1 \vee x_2 \vee x_3)(x_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3), \\ & (x_1 \vee x_2)(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3), (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)(\bar{x}_1 \vee x_2 \vee \bar{x}_3)(x_1 \vee \bar{x}_2 \vee \bar{x}_3)\}, \end{aligned}$$

$|G^*| = 116$ , в то время как  $|G| = 56$ .

Вопрос «Является ли множество  $G^*$  исчерпывающим, если базис  $B \subseteq B_3$ , а базисные элементы подвержены неисправностям типа 0 на выходах?» остается открытым.

**Цель дальнейших исследований авторов** – найти и описать все функции  $\varphi(x_1, x_2, x_3)$ , наличие которых в полном конечном базисе  $B$  гарантирует реализацию почти всех булевых функций асимптотически оптимальными по надежности схемами, функционирующими с ненадежностью, асимптотически равной  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ .

**Список литературы**

1. **Редькин, Н. П.** Надежность и диагностика схем / Н. П. Редькин. – М. : Изд-во МГУ, 1992.
2. **Алехина, М. А.** О надежности схем в базисах, содержащих функции не более чем трех переменных / М. А. Алехина, А. В. Васин // Ученые записки Казанского государственного университета. – 2009. – Т. 151. – Кн. 2. – С. 25–35. – (Физико-математические науки).
3. **Алехина, М. А.** Синтез асимптотически оптимальных по надежности схем / М. А. Алехина. – Пенза : Информац.-издат. центр ПГУ, 2006. – 156 с.
4. **Алехина, М. А.** О надежности схем в одном базисе / М. А. Алехина // Проблемы автоматизации и управления в технических системах : труды Междунар. конф. (г. Пенза, 20–23 октября 2009 г.). – Пенза : Изд-во ПГУ, 2009. – С. 43–44.
5. **Пичугина, П. Г.** Оптимальные схемы в специальном базисе / П. Г. Пичугина // Проблемы автоматизации и управления в технических системах : труды Междунар. конф. (г. Пенза, 20–23 октября 2009 г.). – Пенза : Изд-во ПГУ, 2009. – С. 82–85.
6. **Алехина, М. А.** Достаточные условия реализации булевых функций асимптотически оптимальными схемами с тривиальной оценкой ненадежности / М. А. Алехина, Д. М. Клянчина // Надежность и качество : труды Междунар. симпозиума (Пенза, 24–31 мая 2010 г.). – Пенза : Изд-во ПГУ, 2010. – Т. 1. – С. 229–232.
7. **Васин, А. В.** Необходимые и достаточные условия реализации булевых функций асимптотически оптимальными схемами с ненадежностью  $2\varepsilon$  / А. В. Васин // Дискретная математика и ее приложения : материалы X Международного семинара (г. Москва, 1–6 февраля 2010 г.). – М. : Изд-во мех.-мат. фак. МГУ, 2010. – С. 94–97.
8. **Алехина, М. А.** О надежности схем в базисах, содержащих медиану / М. А. Алехина // Дискретные модели в теории управляющих систем : труды VIII Междунар. конф. – М. : Издательский отдел ф-та ВМиК МГУ им. М. В. Ломоносова ; МАКС Пресс, 2009. – С. 13–17.

**Алехина Марина Анатольевна**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующая кафедрой  
дискретной математики, Пензенский  
государственный университет

E-mail: dm@pnzgu.ru

**Alekhina Marina Anatolyevna**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of discrete mathematics,  
Penza State University

**Клянчина Дарья Михайловна**

аспирант, Пензенский  
государственный университет

E-mail: dm@pnzgu.ru

**Klyanchina Darya Mikhailovna**

Postgraduate student,  
Penza State University

УДК 519.718

**Алехина, М. А.**

**Об асимптотически оптимальных по надежности схемах в некоторых специальных базисах** / М. А. Алехина, Д. М. Клянчина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 3–13.

## СУЩЕСТВОВАНИЕ ОБОБЩЕННЫХ ВТУЛОЧНЫХ СВЯЗЕЙ, СОВМЕСТИМЫХ С ARG-ДЕФОРМАЦИЯМИ ПОВЕРХНОСТЕЙ В РИМАНОВОМ ПРОСТРАНСТВЕ

*Аннотация.* Даются достаточные условия существования счетного множества обобщенных втулочных связей, совместимых с нетривиальными ARG-деформациями поверхностей положительной внешней кривизны с краем в римановом пространстве при заданном коэффициенте рекуррентности.

*Ключевые слова:* риманово пространство, поверхность, внешняя кривизна, обобщенная втулочная связь, ARG-деформация.

*Abstract.* The sufficient conditions of the existence of the denumerable set of the generalized hub relations compatible with the nontrivial ARG-deformations of the surfaces of positive curvature with boundary in a Riemannian space with the preassigned coefficient of the recurrent are given.

*Keywords:* Riemannian space, surface, exterior curvature, generalized hub relation, ARG-deformation.

### 1. Предварительные сведения

Пусть  $R^3$  – трехмерное риманово пространство с координатами  $y^\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) и метрикой  $ds^2 = a_{\alpha\beta} dy^\alpha dy^\beta$ , где  $a_{\alpha\beta} \in C^{4,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ ,  $F^2$  –  $(m+1)$ -связная поверхность с краем, заданная уравнениями  $y^\alpha = f^\alpha(x^1, x^2)$ ,  $\alpha = 1, 2, 3$ ,  $(x^1, x^2) \in D$ , где  $f^\alpha(x^1, x^2)$  – функции класса  $C^{3,\nu}(D)$ . Пусть далее граница  $\partial D$  области  $D$  принадлежит классу  $C^{2,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Эти условия будем называть условиями регулярности поверхности. Будем считать, что внешняя кривизна поверхности положительна  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ . Рассмотрим бесконечно малую деформацию  $\{F_\varepsilon^2\}$  ( $F_0^2 = F^2$ ) поверхности  $F^2$ , определяемую уравнениями  $y_\varepsilon^\alpha = y^\alpha + \varepsilon z^\alpha$ , где  $z^\alpha$  – векторное поле смещения точек поверхности  $F^2$  при ее деформации;  $\varepsilon$  – малый параметр. Представим поле смещения в виде суммы  $z^\alpha = z_\tau^\alpha + z_n^\alpha$ , где  $z_\tau^\alpha = a^i y_{,i}^\alpha$  – тангенциальная составляющая поля  $z^\alpha$ ;  $z_n^\alpha = c n^\alpha$  – нормальная составляющая поля  $z^\alpha$ ;  $n^\alpha$  – поле единичных векторов нормалей к поверхности  $F^2$ ,  $y_{,i}^\alpha = \frac{\partial y^\alpha}{\partial x^i}$ ,  $i = 1, 2$ .

Бесконечно малую деформацию  $\{F_\varepsilon^2\}$  поверхности  $F^2$  называют ARG-деформацией [1], если выполняются условия:

1) вариация  $\delta(d\sigma)$  элемента площади  $d\sigma$  поверхности  $F^2$  удовлетворяет соотношению  $\delta(d\sigma) = 2H\lambda cd\sigma$ , где  $H$  – средняя кривизна поверхности  $F^2$ ;  $\lambda$  – заданное число, называемое коэффициентом рекуррентности;

2) для любой точки поверхности  $F^2$  ее единичный вектор нормали  $n^\alpha$ , параллельно перенесенный в  $R^3$  в смысле Леви-Чивита в направлении вектора  $z^\alpha$  в соответствующую точку поверхности  $F_\varepsilon^2$ , совпадает с вектором нормали  $n_\varepsilon^\alpha$  к  $F_\varepsilon^2$  в этой точке.

Зададим на краю  $\partial F^2$  поверхности  $F^2$  отличное от нуля векторное поле

$$l^\alpha = l_\tau^\alpha + l_n^\alpha, \quad (1)$$

где  $l_\tau^\alpha = l^i y_{,i}^\alpha$  – тангенциальная составляющая поля  $l^\alpha$ ;  $l_n^\alpha = l^3 n^\alpha$  – нормальная составляющая поля  $l^\alpha$ ;  $l^1, l^2, l^3$  – заданные функции класса  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Будем рассматривать бесконечно малые ARG-деформации поверхности  $F^2$ , подчиненной на краю  $\partial F^2$  условию

$$a_{\alpha\beta} z^\alpha l^\beta = h, \quad (2)$$

где  $h$  – заданная функция класса  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Это условие назовем условием обобщенной втулочной связи.

Обобщенная втулочная связь называется корректной [2], если для любой функции  $h$  существует единственное поле смещения  $z^\alpha$ , удовлетворяющее условию (2), при этом малому изменению функции  $h$  (в смысле некоторой нормы) соответствует малое изменение поля  $z^\alpha$ .

Обобщенная втулочная связь называется некорректной [2], если при  $h \neq 0$  поверхность допускает бесконечно малые деформации лишь при выполнении конечного числа условий разрешимости, налагаемых на функцию  $h$ , а при  $h \equiv 0$  поверхность допускает конечное число линейно независимых бесконечно малых деформаций.

## 2. Вывод уравнения бесконечно малых ARG-деформаций

Выведем уравнение, описывающее бесконечно малые ARG-деформации поверхности  $F^2$  положительной внешней кривизны  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ . Здесь и далее в этой работе будем считать, что на поверхности введена изотермически-сопряженная параметризация, т.е. вторая квадратичная форма поверхности имеет вид  $\Pi = \Lambda((dx^1)^2 + (dx^2)^2)$ . Имеет место следующая

**Лемма 1.** Пусть  $(m+1)$ -связная поверхность  $F^2$  положительной внешней кривизны  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , в римановом пространстве  $R^3$ , удовлетворяющая условиям регулярности, подвергнута бесконечно малой ARG-деформации с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$  и с полем смещения  $z^\alpha = a^i y_{,i}^\alpha + c n^\alpha$ . Тогда уравнение для функции  $c$  в координатной форме имеет вид

$$\sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1 + \lambda) 2H \sqrt{g} c = 0.$$

При этом функции  $a^i$  находятся по формуле  $a^i = -\frac{\partial_i c}{\Lambda}$ .

**Доказательство.** Известно [1], что уравнение для функции  $c$ , возникающее при  $ARG$ -деформации поверхности  $F^2$  с коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ , при условии  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , имеет вид

$$\partial_k(\sqrt{g}\tilde{b}^{ik}\partial_i c) + (1+\lambda)2H\sqrt{g}c = 0,$$

где  $g = \det\|g_{ij}\|$ ,  $g_{ij} = a_{\alpha\beta}y_i^\alpha y_j^\beta$ ,  $\|\tilde{b}^{ij}\|$  – матрица, обратная к матрице  $\|b_{ij}\|$  коэффициентов второй квадратичной формы поверхности  $F^2$ ,  $\partial_i c = \frac{\partial c}{\partial x^i}$ . Координаты  $a^i$  находятся из выражения  $a^i = -\tilde{b}^{ij}\partial_j c$ . Так как на поверхности  $F^2$  введена изотермически-сопряженная параметризация, т.е.

$$\Pi = \Lambda\left((dx^1)^2 + (dx^2)^2\right),$$

то  $b_{11} = b_{22} = \Lambda$ ,  $b_{12} = 0$ , при этом  $\tilde{b}^{11} = \tilde{b}^{22} = \frac{1}{\Lambda}$ ,  $\tilde{b}^{12} = 0$ , где  $(x^1, x^2) \in D$ . Тогда уравнение для функции  $c$ , описывающее  $ARG$ -деформацию поверхности  $F^2$  с коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ , в этих координатах примет вид

$$\sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1+\lambda)2H\sqrt{g}c = 0, \quad (x^1, x^2) \in D,$$

где  $c$  – искомая функция.

При этом функции  $a^i$  находятся по формуле  $a^i = -\frac{\partial_i c}{\Lambda}$ . Лемма доказана.

### 3. Вывод условия обобщенной втулочной связи

Дадим аналитическую запись условия обобщенной втулочной связи. Отметим, что при изотермически-сопряженной параметризации тангенциальная составляющая  $l_\tau^\alpha$  поля  $l^\alpha$  переходит в поле векторов  $l_\tau = \{l_1, l_2\}$  на границе  $\partial D$  области  $D$  в плоскости  $(x^1, x^2)$ . Имеет место

**Лемма 2.** Пусть на краю  $\partial F^2$  поверхности  $F^2$  задано векторное поле (1). Пусть, далее, поверхность  $F^2$  при бесконечно малой  $ARG$ -деформации подчинена вдоль края  $\partial F^2$  условию обобщенной втулочной связи (2). Тогда это условие можно представить в виде

$$\sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} - \Lambda l^3 c = -\Lambda h \text{ на } \partial D, \quad (3)$$

где  $\frac{\partial c}{\partial l}$  – производная по направлению

$$l = \left\{ \frac{l_1}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}}, \frac{l_2}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}} \right\} = \{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2\}$$

в плоскости  $(x^1, x^2)$ ,  $l_i = g_{ij}l^j$ .

**Доказательство.** Так как координаты векторного поля смещения  $z^\alpha$  имеют вид  $z^\alpha = a^i y_{,i}^\alpha + cn^\alpha$ , а координаты  $l^\alpha$  имеют вид  $l^\alpha = l^i y_{,i}^\alpha + l^3 n^\alpha$ , то

$$\begin{aligned} a_{\alpha\beta} z^\alpha l^\beta &= a_{\alpha\beta} (a^i y_{,i}^\alpha + cn^\alpha) (l^j y_{,j}^\beta + l^3 n^\beta) = a_{\alpha\beta} y_{,i}^\alpha y_{,j}^\beta a^i l^j + \\ &+ a_{\alpha\beta} y_{,j}^\beta n^\alpha c l^j + a_{\alpha\beta} y_{,i}^\alpha n^\beta a^i l^3 + a_{\alpha\beta} n^\alpha n^\beta c l^3 = g_{ij} a^i l^j + c l^3 = \\ &= a^i l_i + c l^3 = \left( -\frac{\partial_1 c}{\Lambda} l_1 \right) + \left( -\frac{\partial_2 c}{\Lambda} l_2 \right) + c l^3 = -\frac{1}{\Lambda} (\partial_1 c \cdot l_1 + \partial_2 c \cdot l_2) + c l^3. \end{aligned}$$

Подставим последнее равенство в (2) и получим

$$\partial_1 c \cdot l_1 + \partial_2 c \cdot l_2 - \Lambda c l^3 = -\Lambda h. \quad (4)$$

Умножим (4) на  $\frac{1}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}}$  и получим

$$\frac{\partial c}{\partial l} - \frac{\Lambda l^3 c}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}} = -\frac{\Lambda h}{\sqrt{l_1^2 + l_2^2}},$$

где  $\frac{\partial c}{\partial l} = \partial_1 c \cdot \tilde{l}_1 + \partial_2 c \cdot \tilde{l}_2$  – производная по направлению  $l = \{\tilde{l}_1, \tilde{l}_2\}$  в плоскости  $(x^1, x^2)$ . Умножим последнее равенство на  $\sqrt{l_1^2 + l_2^2}$  и получим  $\sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} - \Lambda l^3 c = -\Lambda h$ , что совпадает с (3). Лемма доказана.

#### 4. Корректные обобщенные втулочные связи при бесконечно малых ARG-деформациях поверхностей

Для формулировки результатов введем в рассмотрение правый сопровождающий трехгранник Френе  $\{t^\alpha, \eta^\alpha, n^\alpha\}$  края  $\partial F^2$  поверхности  $F^2$ , где  $t^\alpha$  – поле единичных векторов касательных к краю  $\partial F^2$ ;  $\eta^\alpha$  – поле единичных векторов тангенциальных нормалей к краю  $\partial F^2$ ,  $n^\alpha$  – поле единичных векторов нормалей к краю  $\partial F^2$ .

В этом пункте будем рассматривать бесконечно малые ARG-деформации поверхности  $F^2$ , подчиненной на краю  $\partial F^2$  условию обобщенной втулочной связи

$$a_{\alpha\beta} z^\alpha l^\beta = h, \quad (5)$$

где поле  $l^\alpha = l^i y_i^\alpha + l^3 n^\alpha$  таково, что его тангенциальная составляющая  $l_\tau^\alpha = l^i y_i^\alpha$  образует тупой угол с тангенциальной нормалью  $\eta^\alpha$  края поверхности  $F^2$ , координата  $l^3 \leq 0$ .

Имеет место следующая

**Теорема 1.** Пусть  $(m+1)$ -связная поверхность  $F^2$  положительной внешней кривизны  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , в римановом пространстве  $R^3$  удовлетворяет условиям регулярности, ориентирована так, что средняя кривизна  $H > 0$ , и подвергнута бесконечно малой ARG-деформации с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ ,  $\lambda < -1$ . Пусть далее поверхность  $F^2$  подчинена на краю  $\partial F^2$  условию обобщенной втулочной связи (5). Тогда эта связь является корректной в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , в отношении бесконечно малых ARG-деформаций с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ ,  $\lambda < -1$ . Причем поле смещения  $z^\alpha$  принадлежит классу  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , а его нормальная составляющая  $sn^\alpha$  принадлежит классу  $C^{2,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

**Доказательство.** Нахождение бесконечно малых ARG-деформаций поверхности  $F^2$  с полем смещения  $z^\alpha = a^i y_i^\alpha + cn^\alpha$  при условии обобщенной втулочной связи (5), как было показано в леммах 1 и 2, сводится к изучению разрешимости краевой задачи

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1+\lambda)2H\sqrt{g}c = 0 \text{ в } D, \\ \sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} - \Lambda l^3 c = \tilde{h} \text{ на } \partial D, \end{cases} \quad (6)$$

где  $\tilde{h} = -\Lambda h$ ;  $\sqrt{g} \in C^{2,\nu}$ ,  $\Lambda \in C^{1,\nu}$ ,  $H \in C^{1,\nu}$ ,  $l \in C^{1,\nu}$ ,  $l^3 \in C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

При этом функции  $a^i$  находятся по формуле  $a^i = -\frac{\partial_i c}{\Lambda}$ .

Так как внешняя кривизна поверхности положительна  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , то уравнение задачи (6) является эллиптическим. В силу ориентации поверхности  $\Lambda > 0$ , поэтому  $\frac{\sqrt{g}}{\Lambda} > 0$ . По условию теоремы  $\lambda < -1$  и  $H > 0$ , поэтому для уравнения задачи (6) имеем  $(1+\lambda)2H\sqrt{g} < 0$ . Так как тангенциальная составляющая  $l_\tau^\alpha$  поля  $l^\alpha$  образует тупой угол с тангенциальной нормалью  $\eta^\alpha$  края поверхности  $F^2$ , то при изотермически-сопряженной параметризации прообраз  $l_\tau$  вектора  $l_\tau^\alpha$  и прообраз  $\eta$  вектора  $\eta^\alpha$  образуют тупой угол в плоскости  $(x^1, x^2)$ . Следовательно, вектор  $l_\tau$  образует острый угол с внешней нормалью к области  $D$ . Поэтому краевая задача (6) является третьей краевой задачей. По условию теоремы функция  $l^3 \leq 0$ , поэтому  $-\Lambda l^3 \geq 0$ . В силу сказанного задача (6) для любой заданной

функции  $h$  класса  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , имеет единственное решение  $c$  класса  $C^{2,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Это решение можно представить в виде

$$c(x^1, x^2) = \int_{\partial D} F(x^1, x^2, y^1, y^2) \tilde{h}(y^1, y^2) d_y \sigma,$$

где  $F$  – функция Грина рассматриваемой задачи. При этом справедлива оценка

$$\|c\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})} \leq P \|\tilde{h}\|_{C^{1,\nu}(\partial D)}, \quad (7)$$

где  $P = \text{const}$ .

По известной функции  $c$  однозначно восстанавливается поле смещения  $z^\alpha$ , совместимое с заданной обобщенной втулочной связью поверхности  $F^2$  вдоль края  $\partial F^2$ . При этом поле смещения  $z^\alpha$  является полем класса  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , в области  $\bar{D}$ , причем его нормальная составляющая  $cn^\alpha$  принадлежит классу  $C^{2,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

Покажем, что при сделанных предположениях данная связь является корректной. Для этого необходимо убедиться, что малому изменению величины  $\tilde{h}$  в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , соответствует малое изменение поля смещения  $z^\alpha$  в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

Запишем задачу (6) в операторном виде:

$$\begin{cases} Lc = 0 \text{ в } D, \\ Bc = \tilde{h} \text{ на } D, \end{cases} \quad (8)$$

$$\text{где } L = \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i \right) + (1 + \lambda) 2H \sqrt{g}, \quad B = \sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial}{\partial l} - \Lambda l^3.$$

Пусть имеем два значения величины  $\tilde{h}$ :  $\tilde{h} = h_1$ ,  $\tilde{h} = h_2$ . Обозначив решение задачи (8) при  $\tilde{h} = h_1$  через  $c_1$ , а при  $\tilde{h} = h_2$  через  $c_2$ , получим

$$\begin{cases} Lc_1 = 0 \text{ в } D, \\ Bc_1 = \tilde{h}_1 \text{ на } D, \end{cases} \quad \begin{cases} Lc_2 = 0 \text{ в } D, \\ Bc_2 = \tilde{h}_2 \text{ на } D. \end{cases}$$

Тогда, вычитая из первой полученной задачи вторую, находим

$$\begin{cases} L(c_1 - c_2) = 0 \text{ в } D, \\ B(c_1 - c_2) = h_1 - h_2 \text{ на } D. \end{cases} \quad (9)$$

В силу оценки (7) для задачи (9) имеем

$$\|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})} \leq P \|h_1 - h_2\|_{C^{1,\nu}(\partial D)}.$$

Далее имеем

$$z_1^\alpha - z_2^\alpha = (a_1^1 - a_2^1) y_1^\alpha + (a_1^2 - a_2^2) y_2^\alpha + (c_1 - c_2) n^\alpha =$$

$$= -\frac{1}{\Lambda} \partial_1(c_1 - c_2)y_1^\alpha - \frac{1}{\Lambda} \partial_2(c_1 - c_2)y_2^\alpha + (c_1 - c_2)n^\alpha,$$

где  $z_i^\alpha$  – векторное поле, соответствующее решению задачи (8) при  $\tilde{h} = h_i$ .

Так как

$$\|\partial_1(c_1 - c_2)\|_{C^{1,\nu}(\bar{D})} \leq \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})}, \quad \|\partial_2(c_1 - c_2)\|_{C^{1,\nu}(\bar{D})} \leq \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})},$$

то

$$\|z_1^\beta - z_2^\beta\|_{C^{1,\nu}(\bar{D})} \leq \frac{1}{\Lambda} \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})} + \frac{1}{\Lambda} \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})} + \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})}.$$

Следовательно,

$$\|z_1^\alpha - z_2^\alpha\|_{C^{1,\nu}(\bar{D})} \leq \frac{2 + \Lambda}{\Lambda} \|c_1 - c_2\|_{C^{2,\nu}(\bar{D})} \leq \frac{P}{\Lambda} (2 + \Lambda) \|h_1 - h_2\|_{C^{1,\nu}(\partial D)}.$$

Таким образом, малому изменению величины  $\tilde{h}$  соответствует малое изменение поля смещения  $z^\alpha$  в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Следовательно, обобщенная втулочная связь (5) является корректной в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , в отношении бесконечно малых ARG-деформаций с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ ,  $\lambda < -1$ . Теорема доказана.

**Замечание.** Если коэффициент рекуррентности ARG-деформации  $\lambda = -1$  и обобщенная втулочная связь (5) такова, что  $l^3 < 0$ , то эта связь является корректной в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , в отношении ARG-деформации с коэффициентом рекуррентности  $\lambda = -1$ .

### 5. Распределение некорректных обобщенных втулочных связей поверхностей при бесконечно малых ARG-деформациях поверхностей

Исследуем корректность обобщенной втулочной связи  $a_{\beta\gamma} z^\beta l^\gamma = h$ , освободившись от требований, налагаемых на функцию  $l^3$  в теореме 1. Для изучения этого вопроса исследуем поведение поверхности при обобщенных втулках, которые выбираются из некоторого семейства обобщенных втулок. С этой целью рассмотрим заданное вдоль края  $\partial F^2$  поверхности  $F^2$  векторное поле  $l_{(1)}^\alpha = l^i y_{,i}^\alpha + l_0^3 n^\alpha$ , где тангенциальная составляющая  $l_\tau^\alpha = l^i y_{,i}^\alpha$  сопряжена с направлением  $t^\alpha$  края поверхности  $F^2$  и образует тупой угол с тангенциальной нормалью  $\eta^\alpha$  края поверхности  $F^2$ , координата  $l_0^3 > 0$ ,  $l^1, l^2, l_0^3 \in C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

Введем в рассмотрение семейство векторных полей  $l_{(\mu)}^\alpha = l^i y_{,i}^\alpha + \mu l_0^3 n^\alpha$ , где  $\mu$  – числовой параметр. Каждое поле этого семейства порождает обобщенную втулочную связь

$$a_{\alpha\beta} z^\alpha l_{(\mu)}^\beta = h. \quad (10)$$

Поведение поверхности, подчиненной таким обобщенным втулочным связям, дается следующей теоремой.

**Теорема 2.** Пусть  $(m+1)$ -связная поверхность  $F^2$  положительной внешней кривизны  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , в римановом пространстве  $R^3$  удовлетворяет условиям регулярности, ориентирована так, что ее средняя кривизна  $H > 0$ , и подвергнута бесконечно малой ARG-деформации с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ , где  $\lambda < -1$ . Пусть далее поверхность  $F^2$  подчинена на краю  $\partial F^2$  условию обобщенной втулочной связи (10). Тогда существует точно счетное множество  $\{\mu_k\}_{k=1}^\infty$  значений  $\mu$ ,  $0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_k \leq \dots$ ,  $\mu_k \rightarrow \infty$  при  $k \rightarrow \infty$  таких, что при заданном  $\mu$ :

а)  $\mu \neq \mu_k$ , поверхность  $F^2$  допускает единственную бесконечно малую ARG-деформацию с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ , где  $\lambda < -1$ , при условии обобщенной втулочной связи (10);

б)  $\mu = \mu_k$ , обобщенная втулочная связь является некорректной в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ , в отношении бесконечно малых ARG-деформаций с заданным коэффициентом рекуррентности  $\lambda$ , где  $\lambda < -1$ .

**Доказательство.** Нахождение бесконечно малых ARG-деформаций поверхности  $F^2$  с полем смещения  $z^\alpha = a^i y_{,i}^\alpha + cn^\alpha$  при условии обобщенной втулочной связи (10), как было показано в леммах 1 и 2, сводится к изучению разрешимости краевой задачи

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1+\lambda)2H\sqrt{g}c = 0 \text{ в } D, \\ \sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} - \mu \Lambda l^3 c = \tilde{h} \text{ на } \partial D, \end{cases} \quad (11)$$

где  $\tilde{h} = -\Lambda h$ ,  $\sqrt{g} \in C^{2,\nu}$ ,  $\Lambda \in C^{1,\nu}$ ,  $H \in C^{1,\nu}$ ,  $l \in C^{1,\nu}$ ,  $l_0^3 \in C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ .

При этом функции  $a^i$  находятся по формуле  $a^i = -\frac{\partial_i c}{\Lambda}$ .

Перепишем задачу (11) в виде

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1+\lambda)2H\sqrt{g}c = 0 \text{ в } D, \\ \sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} = h^* \text{ на } \partial D, \end{cases} \quad (12)$$

где  $h^* = \tilde{h} + \mu l_0^3 \Lambda c$ .

Так как внешняя кривизна поверхности положительна  $K \geq k_0 > 0$ ,  $k_0 = \text{const}$ , то уравнение задачи (12) является эллиптическим. В силу ориентации поверхности  $\Lambda > 0$ , поэтому  $\frac{\sqrt{g}}{\Lambda} > 0$ . По условию теоремы  $\lambda < -1$  и

$H > 0$ , поэтому для уравнения задачи (12) имеем  $(1 + \lambda)2H\sqrt{g} < 0$ . Так как тангенциальная составляющая сопряжена с направлением  $t^\alpha$  края поверхности  $F^2$  и образует тупой угол с тангенциальной нормалью  $\eta^\alpha$  края поверхности  $F^2$ , то при изотермически-сопряженной параметризации направление прообраза  $l_\tau$  вектора  $l_\tau^\alpha$  совпадает с направлением внешней нормали к области  $D$  в плоскости  $(x^1, x^2)$ . Поэтому задача (12) является задачей Неймана. Для задачи (12), считая функцию  $h^*$  известной, выполняется теорема существования и единственности, так как  $\lambda < -1$ .

Решение задачи (12) можем представить в виде

$$c(x^1, x^2) = \int_{\partial D} F(x^1, x^2, \varphi(\sigma), \psi(\sigma)) h^*(\sigma) d\sigma, \quad (13)$$

где  $F$  – функция Грина задачи (12);  $d\sigma$  – элемент длины дуги  $\partial D$ ,  $(x^1, x^2) \in \bar{D}$ ,  $x^1 = \varphi(s)$ ,  $x^2 = \psi(s)$ ;  $s \in [s_1, s_2]$  – уравнение границы  $\partial D$ .

Сведем краевую задачу (12) к интегральному уравнению на контуре  $\partial D$ . С этой целью преобразуем формулу (13), подставив в нее явный вид функции  $h^*$ . Имеем

$$c(x^1, x^2) - \mu \int_{\partial D} F(x^1, x^2, \varphi(\sigma), \psi(\sigma)) \chi(\sigma) c(\sigma) d\sigma = g(x^1, x^2), \quad (14)$$

где  $(x^1, x^2) \in \bar{D}$ ,  $g(x^1, x^2) = \int_{\partial D} F(x^1, x^2, \varphi(\sigma), \psi(\sigma)) \tilde{h}(\sigma) d\sigma$  – известная функция

в  $\bar{D}$ ,  $c(\sigma) = c(\varphi(\sigma), \psi(\sigma))$ ,  $\chi(\sigma) = l_0^3(\sigma) \Lambda(\sigma)$ .

Функцию Грина на контуре  $\partial D$  запишем в виде

$$\tilde{F}(s, \sigma) \equiv F(\varphi(s), \psi(s), \varphi(\sigma), \psi(\sigma)).$$

Тогда, переходя в уравнении (14) на контур  $\partial D$ , получим интегральное уравнение относительно искомой функции  $c(\varphi(s), \psi(s)) = c(s)$ :

$$c(s) - \mu \int_{\partial D} K(s, \sigma) c(\sigma) d\sigma = g(s), \quad (15)$$

где  $K(s, \sigma) = \tilde{F}(s, \sigma) \chi(\sigma)$ ,  $g(s)$  – известная функция на  $\partial D$ .

Изучим разрешимость уравнения (15). Задача (12) является самосопряженной. Известно, что для самосопряженной задачи функция Грина является симметричной, а значит,  $\tilde{F}(s, \sigma)$  является симметричной функцией. Ядро уравнения (15) несимметрично, но оно симметризуемо. В самом деле, умножим обе части уравнения (15) на  $\sqrt{\chi(s)}$ , где  $\chi(s) > 0$ , и введем новую искомую функцию  $\tilde{c}(s) = \sqrt{\chi(s)} c(s)$ . Тогда уравнение (15) приводится к линейному интегральному уравнению вида

$$\tilde{c}(s) - \mu \int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) \tilde{c}(\sigma) d\sigma = \tilde{g}(s), \quad (16)$$

где  $\tilde{K}(s, \sigma) = \sqrt{\chi(s)\chi(\sigma)}\tilde{F}(s, \sigma)$  – симметричное ядро,  $\tilde{g}(s) = \sqrt{\chi(s)}g(s)$ .

Известно, что симметричное и не равное тождественно нулю ядро имеет по крайней мере одно собственное значение. Так как заданная функция  $l_0^3$  является положительной, то при  $\mu \leq 0$  задача (11) имеет единственное решение в силу теоремы 1 в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Поэтому собственные значения  $\mu_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) уравнения (16) будут положительны.

Занумеруем собственные значения  $\mu_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) уравнения (16) так, чтобы их номера возрастали по мере увеличения соответствующих значений  $\mu_k$ , т.е.  $0 < \mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_k \leq \dots$ . Убедимся, что для уравнения (16) существует точно счетное множество собственных значений.

Так как собственные значения  $\mu = \mu_k$  ( $k = 1, 2, \dots$ ) уравнения (16) положительны, то ядро  $\tilde{K}(s, \sigma)$  будет положительно определено.

Покажем, что ядро  $\tilde{K}(s, \sigma)$  полное, т.е.  $\int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) f(\sigma) d\sigma = 0$ , где  $f(s)$  – искомая функция, имеет только нулевое решение.

Пусть  $f(s)$  – решение уравнения  $Af = 0$ , где  $Af = \int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) f(\sigma) d\sigma$ .

Обозначим

$$z(x^1, x^2) = \int_{\partial D} F(x^1, x^2, \varphi(\sigma), \psi(\sigma)) \sqrt{\chi(\sigma)} f(\sigma) d\sigma, \quad (17)$$

где  $(x^1, x^2) \in \bar{D}$ .

Тогда  $z(x^1, x^2)$  есть решение задачи

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1 + \lambda) 2H \sqrt{g} c = 0 \text{ в } D, \\ \sqrt{l_1^2 + l_2^2} \frac{\partial c}{\partial l} = \sqrt{\chi(s)} f(s) \text{ на } \partial D. \end{cases} \quad (18)$$

Перейдем в уравнении (17) на контур  $\partial D$ . Получим

$$z(s) = \int_{\partial D} \tilde{F}(s, \sigma) \sqrt{\chi(\sigma)} f(\sigma) d\sigma. \quad (19)$$

Умножим (19) на  $\sqrt{\chi(s)}$ . Имеем

$$\sqrt{\chi(s)} z(s) = \int_{\partial D} \tilde{F}(s, \sigma) \sqrt{\chi(s)\chi(\sigma)} f(\sigma) d\sigma. \quad (20)$$

Так как в наших обозначениях  $\tilde{K}(s, \sigma) = \sqrt{\chi(s)\chi(\sigma)}\tilde{F}(s, \sigma)$ , где  $\tilde{K}(s, \sigma)$  – ядро уравнения (16), то формулу (20) можно записать в виде

$$\sqrt{\chi(s)}z(s) = \int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) f(\sigma) d\sigma. \quad (21)$$

Но функция  $f(s)$  есть решение уравнения  $Af = 0$ , т.е.  $\int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) f(\sigma) d\sigma = 0$ . Тогда из (21) следует, что  $\sqrt{\chi(s)}z(s) = 0$ , поэтому  $z(s) = 0$  на границе  $\partial D$ . Но тогда  $z(x^1, x^2)$  в области  $D$  находится как решение задачи Дирихле

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^2 \partial_i \left( \frac{\sqrt{g}}{\Lambda} \partial_i c \right) + (1 + \lambda) 2H \sqrt{g} z = 0 \text{ в } D, \\ z = 0 \text{ на } \partial D, \end{cases} \quad (22)$$

Так как  $(1 + \lambda) 2H \sqrt{g} < 0$  и  $\frac{\sqrt{g}}{\Lambda} > 0$ , то задача (22) имеет единственное решение  $z(x^1, x^2) = 0$ ,  $(x^1, x^2) \in \bar{D}$ . Тогда  $\frac{\partial z}{\partial l} \equiv 0$  на  $\partial D$ . В силу краевого условия задачи (18) имеем  $\sqrt{\chi(s)}f(s) = 0$  на  $\partial D$ , т.е.  $f(s) \equiv 0$  на  $\partial D$ .

Итак, доказано, что уравнение  $\int_{\partial D} \tilde{K}(s, \sigma) f(\sigma) d\sigma = 0$  имеет только нулевое решение, а значит, что ядро  $\tilde{K}(s, \sigma)$  полное. Откуда следует, что система собственных функций ядра бесконечна. Таким образом, установлено, что существует счетное множество собственных значений уравнения (16). Восстановление поля деформации  $z^\alpha$  по известной функции  $c$  проводится всегда и однозначно с помощью методов, описанных в разд. 2. Если  $\mu \neq \mu_k$ , то уравнение (16) имеет единственное решение в классе  $C^{1,\nu}$ ,  $0 < \nu < 1$ . Теорема доказана.

### Список литературы

1. **Fomenko, V. T.** ARG-deformations of a hypersurface with a boundary in a Riemannian space / V. T. Fomenko // Tensor N.S. – 1993. – V. 54. – Chigasaki, Japan.
2. **Векуа, И. Н.** Обобщенные аналитические функции / И. Н. Векуа ; под ред. О. А. Олейник и Б. В. Шабата. – 2-е изд., перераб. – М. : Наука, 1988. – 512 с.

**Коломыцева Елена Алексеевна**  
аспирант, Таганрогский государственный педагогический институт  
E-mail: kolomytseva86@mail.ru

**Kolomytseva Elena Alekseevna**  
Postgraduate student,  
Taganrog State Pedagogical University

УДК 514.75

**Коломыцева, Е. А.**

**Существование обобщенных втулочных связей, совместимых с  $ARG$ -деформациями поверхностей в римановом пространстве / Е. А. Коломыцева // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 14–25.**

## О НАДЕЖНОСТИ НЕВЕТВЯЩИХСЯ ПРОГРАММ В БАЗИСЕ, СОДЕРЖАЩЕМ ФУНКЦИЮ ВИДА $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ <sup>1</sup>

*Аннотация.* Рассматривается реализация булевых функций неветвящимися программами с оператором условной остановки в полном конечном базисе  $B$ , содержащем некоторую функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ . Предполагается, что функциональные операторы с вероятностью  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \in (0, 1/2)$ ) подвержены инверсным неисправностям на выходах, а операторы условной остановки абсолютно надежны. Доказано, что любую булеву функцию  $f$  можно реализовать неветвящейся программой, функционирующей с ненадежностью не больше  $\varepsilon + 81\varepsilon^2$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ .

*Ключевые слова:* булевы функции, неветвящиеся программы, оператор условной остановки, синтез, надежность.

*Abstract.* The problem of synthesis of nobranching programs with conditional stop-operator is considered in full finite basis, contained some kind function  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ . All functional operators are supposed to be prone output inverse failures with probability  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \in (0, 1/2)$ ). Conditional stop-operators are absolutely reliable. Any boolean function is proved to be possible to realize by nobranching program, functioned with unreliability no more  $\varepsilon + 81\varepsilon^2$  at  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ .

*Keywords:* boolean functions, nobranching programs, conditional stop-operator, synthesis, reliability.

### Введение

Рассматривается реализация булевых функций неветвящимися программами с оператором условной остановки [1] в полном конечном базисе  $B$ . Программы с оператором условной остановки характеризуются наличием управляющей команды – команды условной остановки, дающей возможность досрочного прекращения работы при выполнении определенного условия. Сформулируем необходимые понятия и определения (см. работу [1]).

Пусть  $X = \{x_1, \dots, x_n\}$  – множество независимых булевых переменных,  $\tilde{x} = (x_1, \dots, x_n)$  – набор независимых переменных,  $n \in \mathbb{N}$ . Введем множества переменных  $Y = \{y_1, \dots, y_l\}$  и  $Z = \{z_1, \dots, z_m\}$ ,  $l \in \mathbb{N}$ ,  $m \in \mathbb{N}$ . Переменные из множества  $Y$  назовем внутренними, переменные из множества  $Z$  – выходными переменными. Пусть далее  $a \in Y \cup Z$ ,  $b_1, \dots, b_d \in X \cup Y \cup Z$ , ( $d \in \{1, \dots, n\}$ ),  $h$  – булева функция из базиса  $B$ , зависящая не более чем от  $d$  переменных. *Вычислительной командой*  $p$  назовем выражение  $p: a = h(b_1, \dots, b_d)$ . Переменную  $a$  назовем *выходом* вычислительной команды, переменные  $b_1, \dots, b_d$  – *входами* этой команды.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РГНФ, номер проекта 09-06-28615a/B.

Пусть теперь  $a \in X \cup Y \cup Z$ . Командой остановки  $p$  назовем выражение  $p : \text{stop}(a)$ . Переменную  $a$  назовем входом команды остановки  $p$ .

Последовательность  $\text{Pr} = p_1 \dots p_i \dots p_L$ , состоящая из вычислительных команд и команд остановки, называется *неветвящейся программой с условной остановкой*, если при любом  $j \in \{1, 2, \dots, L\}$  каждый вход команды  $p_j$  есть либо независимая переменная, либо выход некоторой вычислительной команды  $p_i$ , где  $i < j$ .

Неветвящаяся программа работает в дискретные моменты времени  $t = 0, 1, 2, \dots$ , не изменяет значения независимых переменных и изменяет значения внутренних и выходных переменных. Значения  $y_i(\tilde{x}; t)$  внутренних переменных  $y_i$  и значения  $z_j(\tilde{x}; t)$  выходных переменных  $z_j$  программы  $\text{Pr}$  в произвольный момент времени  $t$  на наборе независимых переменных  $\tilde{x} = (x_1, \dots, x_n)$  определим индуктивно следующим образом:

– в начальный момент времени  $t = 0$  значения всех внутренних и выходных переменных считаем неопределенными;

– если команда  $p_t$  не изменяет значения внутренней переменной  $y_i$  (или выходной переменной  $z_j$ ), то положим

$$y_i(\tilde{x}; t) = y_i(\tilde{x}; t-1), \quad z_j(\tilde{x}; t) = z_j(\tilde{x}; t-1);$$

– если команда  $p_t$  изменяет значения внутренней переменной  $y_i$  (или выходной переменной  $z_j$ ), и значения 1-го, ...,  $d$ -го входов команды  $p_t$  в момент времени  $(t-1)$  равны соответственно  $b_1(\tilde{x}; t-1), \dots, b_d(\tilde{x}; t-1)$ , то положим

$$y_i(\tilde{x}; t) = h_t(b_1(\tilde{x}; t-1), \dots, b_d(\tilde{x}; t-1)), \\ z_j(\tilde{x}; t) = h_t(b_1(\tilde{x}; t-1), \dots, b_d(\tilde{x}; t-1)).$$

Значением команды  $p_t$  программы  $\text{Pr}$  на наборе  $\tilde{x} = (x_1, \dots, x_n)$  независимых переменных  $x_1, x_2, \dots, x_n$  назовем значение ее выхода в момент времени  $t$  и обозначим  $p_t(\tilde{x})$ .

Через  $n(p)$  обозначим номер команды  $p$  в программе  $\text{Pr}$ , т.е.  $n(p_i) = i$ . Пусть  $p_{t_1}, \dots, p_{t_r}$  – все команды остановки из  $\text{Pr}$ , причем  $t_1 < \dots < t_r$ . Тогда через  $s_j$  будем обозначать  $j$ -ю команду остановки программы  $\text{Pr}$ , т.е.  $s_j \equiv p_{t_j}$ .

Вычислительную команду  $p_i$  (переменную  $x_l$ ) назовем аргументом команды остановки  $s_j$ ,  $n(s_j) = r$ , и обозначим через  $q_j$ , если

(i) выход команды  $p_i$  (переменная  $x_l$ ) является входом команды  $s_j$ ;

(ii) среди команд  $p_t, i < t < r$ , нет команды, выход которой совпадает с выходом команды  $p_i$ .

Будем говорить, что  $k$ -я команда остановки  $s_k$  прекращает вычисления программы  $\text{Pr}$  на наборе  $\tilde{x}$ , если

$$q_1(\tilde{x}) = \dots = q_{k-1}(\tilde{x}) = 0, \quad q_k(\tilde{x}) = 1.$$

Результат действия программы Pr на наборе  $\tilde{x}$  обозначим через  $\text{Pr}(\tilde{x})$ , его  $l$ -ю компоненту  $\text{Pr}_l(\tilde{x})$  определим следующим образом:

$$\text{Pr}_l(\tilde{x}) = \begin{cases} z_l(\tilde{x}; t_k), & \text{если } q_1(\tilde{x}) = \dots = q_{k-1}(\tilde{x}) = 0, \quad q_k(\tilde{x}) = 1, \\ z_l(\tilde{x}; L), & \text{если } q_1(\tilde{x}) = \dots = q_r(\tilde{x}) = 0, \end{cases}$$

т.е.  $\text{Pr}_l(\tilde{x})$  равно значению  $l$ -й выходной переменной  $z_l$  в момент остановки программы. Легко видеть, что

$$\begin{aligned} \text{Pr}_l(\tilde{x}) &= q_1(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_1) \vee \bar{q}_1(\tilde{x})q_2(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_2) \vee \dots \\ &\dots \vee \bar{q}_1(\tilde{x})\bar{q}_2(\tilde{x}) \dots \bar{q}_{k-1}(\tilde{x})q_k(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_k) \vee \dots \\ &\dots \vee \bar{q}_1(\tilde{x})\bar{q}_2(\tilde{x}) \dots \bar{q}_{r-1}(\tilde{x})q_r(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_r) \vee \dots \vee \bar{q}_1(\tilde{x})\bar{q}_2(\tilde{x}) \dots \bar{q}_r(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; L). \end{aligned} \quad (1)$$

Иногда формулу (1) удобнее использовать в преобразованном виде:

$$\begin{aligned} \text{Pr}_l(\tilde{x}) &= q_1(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_1) \vee \bar{q}_1(\tilde{x})(q_2(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_2) \vee \bar{q}_2(\tilde{x})(\dots(q_{k-1}(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_{k-1}) \vee \\ &\vee \bar{q}_{k-1}(\tilde{x})(\dots \vee \bar{q}_{r-1}(\tilde{x})(q_r(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; t_r) \vee \bar{q}_r(\tilde{x})z_l(\tilde{x}; L))\dots)\dots)). \end{aligned} \quad (2)$$

Программа Pr вычисляет  $n$ -местную булеву функцию  $f$ , если  $\text{Pr}(\tilde{x}) = f(\tilde{x})$  для любого  $\tilde{x}$  из  $\{0,1\}^n$ .

Всюду далее будем считать, что операторы условной остановки абсолютно надежны, а все вычислительные операторы базиса  $B$  независимо друг от друга с вероятностью  $\varepsilon$  ( $\varepsilon \in (0, 1/2)$ ) подвержены инверсным неисправностям на выходах. Поскольку оператор условной остановки абсолютно надежен, он срабатывает, когда на его вход поступает единица. Инверсные неисправности на выходах вычислительных операторов характеризуются тем, что в исправном состоянии вычислительный оператор реализует приписанную ему функцию  $\varphi$ , а в неисправном – функцию  $\bar{\varphi}$ .

Программа Pr реализует булеву функцию  $f(x_1, \dots, x_n)$ , если она реализует ее при отсутствии неисправностей.

Ненадежностью  $N(\text{Pr})$  программы Pr назовем максимальную вероятность ошибки на выходе программы Pr при всевозможных входных наборах.

Обозначим  $N_\varepsilon(f) = \inf N(\text{Pr})$ , где инфимум берется по всем программам Pr, реализующим булеву функцию  $f(\tilde{x})$ .

Программа  $A$ , реализующая функцию  $f$ , называется асимптотически оптимальной по надежности, если  $N(A) \sim N_\varepsilon(f)$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , т.е.  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{N_\varepsilon(f)}{N(A)} = 1$ .

Чтобы использовать в данной работе известные результаты для схем из функциональных элементов, введем понятия ненадежности схемы и асимптотически оптимальной схемы.

Ненадежностью  $N(S)$  схемы  $S$  из функциональных элементов, подверженных инверсным неисправностям на выходах, назовем максимальную вероятность ошибки на выходе схемы  $S$  при всевозможных входных наборах схемы  $S$ . Обозначим  $N_\varepsilon(f) = \inf N(S)$ , где инфимум берется по всем схемам  $S$  из ненадежных элементов, реализующим булеву функцию  $f$ .

Схема  $A$  из ненадежных элементов, реализующая функцию  $f$ , называется асимптотически оптимальной по надежности, если  $N(A) \sim N_\varepsilon(f)$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , т.е.  $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{N_\varepsilon(f)}{N(A)} = 1$ .

**Теорема 1** [2]. В произвольном полном конечном базисе  $B$  любую булеву функцию  $f$  можно реализовать схемой  $S$ , ненадежность которой  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ .

Константа 5 в оценке ненадежности из теоремы 1 в некоторых базисах, например,  $B = \{x_1 \& x_2, \bar{x}_1\}$  и  $B = \{x_1 \vee x_2, \bar{x}_1\}$ , не может быть понижена [4].

### О надежности неветвящихся программ в базисах, содержащих функцию $x_1 \vee x_2$

Пусть полный конечный базис  $B$  содержит  $x_1 \vee x_2$ . Для неветвящихся программ с оператором условной остановки справедливы лемма 1 и теорема 2.

**Лемма 1.** Функцию голосования  $g(x_1, x_2, x_3) = x_1x_2 \vee x_2x_3 \vee x_1x_3$  можно реализовать неветвящейся программой  $\text{Pr}_g$  (рис. 1), ненадежность которой  $N(\text{Pr}_g) = \varepsilon$ .

$$\begin{aligned} \text{Pr}_g : z_1 &= x_2 \vee x_3 \\ &\text{stop}(x_1) \\ z_2 &= x_2 \\ &\text{stop}(x_3) \\ z_3 &= x_3 \end{aligned}$$

Рис. 1

**Доказательство.** По формуле (2) найдем функцию, которую вычисляет программа  $\text{Pr}_g$  (рис. 1):

$$\begin{aligned} \text{Pr}_g(x_1, x_2, x_3) &= x_1(x_2 \vee x_3) \vee \bar{x}_1(x_3x_2 \vee \bar{x}_3x_3) = x_1x_2 \vee x_1x_3 \vee \bar{x}_1x_2x_3 = \\ &= x_2(x_1 \vee \bar{x}_1x_3) \vee x_1x_3 = x_2(x_1 \vee x_3) \vee x_1x_3 = x_1x_2 \vee x_2x_3 \vee x_1x_3. \end{aligned}$$

Оценим вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_g$  на всевозможных входных наборах  $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ .

Отметим, что на наборах  $(0, 0, 0)$ ,  $(0, 0, 1)$ ,  $(0, 1, 0)$  и  $(0, 1, 1)$  вероятность ошибки равна 0, так как stop-оператор  $\text{stop}(x_1)$  на этих наборах не срабатывает, а следовательно, ошибка функционального оператора  $z_1 = x_2 \vee x_3$  не влияет на результат работы программы  $\text{Pr}_g$ .

Пусть входной набор  $\tilde{\alpha}$  равен одному из наборов  $(1, 1, 1)$ ,  $(1, 1, 0)$ ,  $(1, 0, 1)$ . Обозначим  $P_0(\text{Pr}_g, \tilde{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_g$ :

$$P_0(\text{Pr}_g, \tilde{\alpha}) = \varepsilon.$$

Пусть входной набор  $\check{\alpha} = (1, 0, 0)$ . Обозначим  $P_1(\text{Pr}_g, \check{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_g$ :

$$P_1(\text{Pr}_g, \check{\alpha}) = \varepsilon.$$

Таким образом,  $N(\text{Pr}_g) = \varepsilon$ .

**Лемма 1 доказана.**

Программу  $\text{Pr}_g$  (рис. 1) будем использовать для повышения надежности программ, реализующих произвольные функции.

**Теорема 2.** В полном конечном базисе  $B$ , содержащем  $x_1 \vee x_2$ , при любом  $n \in N$  любую функцию  $f(x_1, \dots, x_n)$  можно реализовать такой программой  $\text{Pr}_f^*$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  справедливо неравенство  $N(\text{Pr}_f^*) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $x_1 \vee x_2$ . Пусть  $f(x_1, \dots, x_n)$  – произвольная булева функция,  $n \in N$ . По теореме 1 ее можно реализовать схемой  $S$ , которая при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  функционирует с ненадежностью  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$ . Используя схему  $S$ , построим для  $f$  неветвящуюся программу с абсолютно надежными операторами условной остановки  $\text{Pr}_f^*$  (рис. 2).

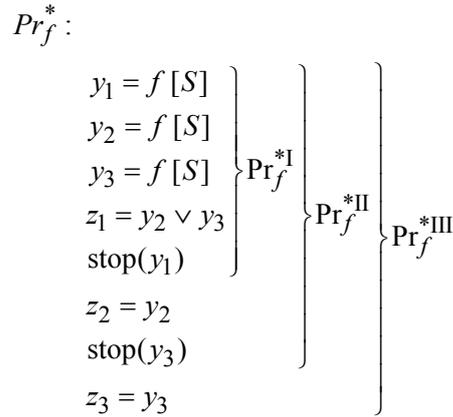


Рис. 2

Программа  $\text{Pr}_f^*$  имеет один выход. Выделим в ней три подпрограммы,  $\text{Pr}_f^{*I}$ ,  $\text{Pr}_f^{*II}$  и  $\text{Pr}_f^{*III}$  (см. рис. 2). Если срабатывает первый stop-оператор  $\text{stop}(y_1)$ , то выполнение программы прекращается и на выход программы идет значение выходной переменной  $z_1$ , если срабатывает второй stop-оператор  $\text{stop}(y_3)$  – значение выходной переменной  $z_2$ . При этом результат работы программы совпадает с результатом работ соответственно первой  $\text{Pr}_f^{*I}$  или второй  $\text{Pr}_f^{*II}$  подпрограмм. Если же операторы условной остановки

не срабатывают, выполнение программы продолжается и на выход идет значение выходной переменной  $z_3$ . В этом случае результат работы программы совпадает с результатом работы третьей подпрограммы  $\text{Pr}_f^{*\text{III}}$ .

Вычислим и оценим вероятности ошибок на выходе программы  $\text{Pr}_f^*$ .

Пусть входной набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 0$ . Обозначим  $P_1(S, \tilde{a})$  вероятность ошибки схемы  $S$  на наборе  $\tilde{a}$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_1(\text{Pr}_f^*, \tilde{a}) &= (1 - P_1(S, \tilde{a}))^3 \cdot 0 + P_1(S, \tilde{a})(1 - P_1(S, \tilde{a}))^2 \cdot \varepsilon + \\ &+ (1 - P_1(S, \tilde{a}))P_1(S, \tilde{a})(1 - P_1(S, \tilde{a})) \cdot 0 + (1 - P_1(S, \tilde{a}))^2 P_1(S, \tilde{a}) \cdot 0 + \\ &+ P_1^2(S, \tilde{a})(1 - P_1(S, \tilde{a})) \cdot (1 - \varepsilon) + P_1(S, \tilde{a})(1 - P_1(S, \tilde{a}))P_1(S, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + \\ &+ (1 - P_1(S, \tilde{a}))P_1^2(S, \tilde{a}) \cdot 1 + P_1^3(S, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) \leq P(S)\varepsilon + 3P^2(S). \end{aligned}$$

Поскольку  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_1(\text{Pr}_f^*, \tilde{a}) \leq 86\varepsilon^2. \quad (3)$$

Пусть набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 1$ . Обозначим  $P_0(S, \tilde{a})$  вероятность ошибки схемы  $S$  на наборе  $\tilde{a}$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_0(\text{Pr}_f^*, \tilde{a}) &= (1 - P_0(S, \tilde{a}))^3 \cdot \varepsilon + P_0(S, \tilde{a})(1 - P_0(S, \tilde{a}))^2 \cdot 0 + \\ &+ (1 - P_0(S, \tilde{a}))P_0(S, \tilde{a})(1 - P_0(S, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + (1 - P_0(S, \tilde{a}))^2 P_0(S, \tilde{a}) \cdot \varepsilon + \\ &+ P_0^2(S, \tilde{a})(1 - P_0(S, \tilde{a})) \cdot 1 + P_0(S, \tilde{a})(1 - P_0(S, \tilde{a}))P_0(S, \tilde{a}) \cdot 1 + \\ &+ (1 - P_0(S, \tilde{a}))P_0^2(S, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + P_0^3(S, \tilde{a}) \cdot 1 \leq \varepsilon + 3P^2(S). \end{aligned}$$

Поскольку  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_0(\text{Pr}_f^*, \tilde{a}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2. \quad (4)$$

Из неравенств (3) и (4) следует, что ненадежность программы  $N(\text{Pr}_f^*)$  удовлетворяет неравенству  $N(\text{Pr}_f^*) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Теорема 2 доказана.**

### О надежности неветвящихся программ в базисах, содержащих функцию $\bar{x}_1 \vee x_2$

Пусть полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $\bar{x}_1 \vee x_2$ . Для неветвящихся программ с оператором условной остановки справедливы лемма 2 и теорема 3.

**Лемма 2.** Функцию  $g_1(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 x_2 \vee x_2 x_3 \vee \bar{x}_1 x_3$  можно реализовать неветвящейся программой  $\text{Pr}_{g_1}$  (рис. 3), ненадежность которой  $N(\text{Pr}_{g_1}) = \varepsilon$ .

$$\begin{aligned} \text{Pr}_{g_1} : z_1 &= \bar{x}_1 \vee x_3 \\ &\text{stop}(x_2) \\ z_2 &= x_2 \\ &\text{stop}(x_1) \\ z_3 &= x_3 \end{aligned}$$

Рис. 3

**Доказательство.** По формуле (2) найдем функцию, которую вычисляет программа  $\text{Pr}_{g_1}$  (рис. 3):

$$\begin{aligned} \text{Pr}_{g_1}(x_1, x_2, x_3) &= x_2(\bar{x}_1 \vee x_3) \vee \bar{x}_2(x_1 x_2 \vee \bar{x}_1 x_3) = \bar{x}_1 x_2 \vee x_2 x_3 \vee \bar{x}_1 \bar{x}_2 x_3 = \\ &= \bar{x}_1(x_2 \vee \bar{x}_2 x_3) \vee x_2 x_3 = \bar{x}_1(x_2 \vee x_3) \vee x_2 x_3 = \bar{x}_1 x_2 \vee x_2 x_3 \vee \bar{x}_1 x_3. \end{aligned}$$

Оценим вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_1}$  на всевозможных входных наборах  $\check{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ .

Отметим, что на наборах  $(0, 0, 0)$ ,  $(0, 0, 1)$ ,  $(1, 0, 0)$  и  $(1, 0, 1)$  вероятность ошибки равна 0, так как stop-оператор  $\text{stop}(x_2)$  на этих наборах не срабатывает, а следовательно, ошибка функционального оператора  $z_1 = \bar{x}_1 \vee x_3$  не влияет на результат работы программы  $\text{Pr}_{g_1}$ .

Пусть входной набор  $\check{\alpha}$  равен одному из наборов  $(0, 1, 1)$ ,  $(0, 1, 0)$ ,  $(1, 1, 1)$ . Обозначим  $P_0(\text{Pr}_{g_1}, \check{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_1}$ :

$$P_0(\text{Pr}_{g_1}, \check{\alpha}) = \varepsilon.$$

Пусть входной набор  $\check{\alpha} = (1, 1, 0)$ . Обозначим  $P_1(\text{Pr}_{g_1}, \check{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_1}$ :

$$P_1(\text{Pr}_{g_1}, \check{\alpha}) = \varepsilon.$$

Таким образом,  $N(\text{Pr}_{g_1}) = \varepsilon$ .

**Лемма 2 доказана.**

Программу  $\text{Pr}_{g_1}$  (рис. 3) будем использовать для повышения надежности программ, реализующих произвольные булевы функции.

**Теорема 3.** В полном конечном базисе  $B$ , содержащем  $\bar{x}_1 \vee x_2$ , при любом  $n \in \mathbb{N}$  любую функцию  $f(x_1, \dots, x_n)$  можно реализовать такой программой  $\text{Pr}_f^{**}$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  справедливо неравенство  $N(\text{Pr}_f^{**}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $\bar{x}_1 \vee x_2$ . Пусть  $f(x_1, \dots, x_n)$  – произвольная булева функция,  $n \in \mathbb{N}$ . По теореме 1 функции  $\bar{f}$  и  $f$  можно реализовать схемами  $S_1$  и  $S_2$  соответственно, которые при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  функционируют с ненадежностью, не больше

$5\varepsilon + 182\varepsilon^2$ . Обозначим  $P(S_1)$  и  $P(S_2)$  ненадежности схем  $S_1$  и  $S_2$  соответственно. Пусть  $P = \max\{P(S_1), P(S_2)\}$ . Тогда  $P \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$ . Используя схемы  $S_1$  и  $S_2$ , построим для  $f$  неветвящуюся программу  $\text{Pr}_f^{**}$  (см. рис. 4).

$$\begin{aligned} \text{Pr}_f^{**} : \\ y_1 &= \bar{f} [S_1] \\ y_2 &= f [S_2] \\ y_3 &= f [S_2] \\ z_1 &= \bar{y}_1 \vee y_3 \\ \text{stop}(y_2) \\ z_2 &= y_2 \\ \text{stop}(y_1) \\ z_3 &= y_3 \end{aligned}$$

Рис. 4

Вычислим и оценим вероятности ошибок на выходе программы  $\text{Pr}_f^{**}$ .

Пусть входной набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 0$ . Обозначим  $P_0(S_1, \tilde{a})$  и  $P_1(S_2, \tilde{a})$  вероятности ошибок схем  $S_1$  и  $S_2$  на входном наборе  $\tilde{a}$ . Ясно, что  $P_0(S_1, \tilde{a}) \leq P(S_1)$ ,  $P_1(S_2, \tilde{a}) \leq P(S_2)$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_1(\text{Pr}_f^{**}, \tilde{a}) &= (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))(1 - P_1(S_2, \tilde{a}))^2 \cdot 0 + P_0(S_1, \tilde{a})(1 - P_1(S_2, \tilde{a}))^2 \cdot 0 + \\ &+ (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))P_1(S_2, \tilde{a})(1 - P_1(S_2, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))(1 - P_1(S_2, \tilde{a}))P_1(S_2, \tilde{a}) \cdot 0 + \\ &+ P_0(S_1, \tilde{a})P_1(S_2, \tilde{a})(1 - P_1(S_2, \tilde{a})) \cdot (1 - \varepsilon) + P_0(S_1, \tilde{a})(1 - P_1(S_2, \tilde{a}))P_1(S_2, \tilde{a}) \cdot 1 + \\ &+ (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))P_1^2(S_2, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + P_0(S_1, \tilde{a})P_1^2(S_2, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) \leq P\varepsilon + 3P^2. \end{aligned}$$

Поскольку  $P \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_1(\text{Pr}_f^{**}, \tilde{a}) \leq 86\varepsilon^2. \quad (5)$$

Пусть входной набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 1$ . Обозначим  $P_1(S_1, \tilde{a})$  и  $P_0(S_2, \tilde{a})$  вероятности ошибок схем  $S_1$  и  $S_2$  на входном наборе  $\tilde{a}$ . Ясно, что  $P_1(S_1, \tilde{a}) \leq P(S_1)$ ,  $P_0(S_2, \tilde{a}) \leq P(S_2)$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_0(\text{Pr}_f^{**}, \tilde{a}) &= (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))(1 - P_0(S_2, \tilde{a}))^2 \cdot \varepsilon + P_1(S_1, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a}))^2 \cdot \varepsilon + \\ &(1 - P_1(S_1, \tilde{a}))P_0(S_2, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \cdot 0 + (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \times \\ &\times P_0(S_2, \tilde{a}) \cdot \varepsilon + P_1(S_1, \tilde{a})P_0(S_2, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \cdot 1 + P_1(S_1, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \times \\ &\times P_0(S_2, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))P_0^2(S_2, \tilde{a}) \cdot 1 + P_1(S_1, \tilde{a})P_0^2(S_2, \tilde{a}) \cdot 1 \leq \varepsilon + 3P^2. \end{aligned}$$

Поскольку  $P \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_0(\text{Pr}_f^{**}, \tilde{a}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2. \quad (6)$$

Из неравенств (5) и (6) следует, что ненадежность программы  $N(\text{Pr}_f^{**})$  удовлетворяет неравенству  $N(\text{Pr}_f^{**}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Теорема 3 доказана.**

**Замечание 1.** Теорема 3 справедлива для полных конечных базисов, содержащих  $x_1 \vee \bar{x}_2$ , поскольку функция  $x_1 \vee \bar{x}_2$  получается из функции  $\bar{x}_1 \vee x_2$  переименованием переменных  $x_1$  на  $x_2$  и  $x_2$  на  $x_1$ .

### **О надежности неветвящихся программ в базисах, содержащих функцию $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2$**

Пусть полный конечный базис  $B$  содержит  $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2$ . Для неветвящихся программ с оператором условной остановки справедливы лемма 3 и теорема 4.

**Лемма 3.** *Функцию  $g_2(x_1, x_2, x_3) = \bar{x}_1 x_2 \vee x_2 \bar{x}_3 \vee \bar{x}_1 \bar{x}_3$  можно реализовать неветвящейся программой  $\text{Pr}_{g_2}$ , приведенной на рис. 5, ненадежность которой  $N(\text{Pr}_{g_2}) = \varepsilon$ .*

$$\begin{aligned} \text{Pr}_{g_2} : \\ z_1 &= \bar{x}_1 \vee \bar{x}_3 \\ \text{stop}(x_2) \\ z_2 &= x_2 \\ \text{stop}(x_1) \\ z_3 &= \bar{x}_3 \vee \bar{x}_3 \end{aligned}$$

Рис. 5

**Доказательство.** По формуле (2) найдем функцию, которую вычисляет программа  $\text{Pr}_{g_2}$  (рис. 5):

$$\begin{aligned} \text{Pr}_{g_2}(x_1, x_2, x_3) &= (\bar{x}_1 \vee \bar{x}_3)x_2 \vee \bar{x}_2(x_2x_1 \vee \bar{x}_1(\bar{x}_3 \vee \bar{x}_3)) = \bar{x}_1x_2 \vee x_2\bar{x}_3 \vee \bar{x}_1\bar{x}_2\bar{x}_3 = \\ &= \bar{x}_1(x_2 \vee \bar{x}_2\bar{x}_3) \vee x_2\bar{x}_3 = \bar{x}_1(x_2 \vee \bar{x}_3) \vee x_2\bar{x}_3 = \bar{x}_1x_2 \vee x_2\bar{x}_3 \vee \bar{x}_1\bar{x}_3. \end{aligned}$$

Отметим, что на наборах  $(1, 0, 0)$  и  $(1, 0, 1)$  вероятность ошибки равна 0, так как stop-оператор  $\text{stop}(x_2)$  на этих наборах не срабатывает, но срабатывает stop-оператор  $\text{stop}(x_1)$ , а следовательно, ошибка функциональных операторов  $z_1 = \bar{x}_1 \vee \bar{x}_3$  и  $z_3 = \bar{x}_3 \vee \bar{x}_3$  не влияет на результат работы программы  $\text{Pr}_{g_2}$ .

Оценим вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_2}$  на всевозможных входных наборах  $\tilde{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ .

Пусть входной набор  $\tilde{\alpha} = (0, 0, 0)$ . Обозначим  $P_0(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_2}$ :

$$P_0(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha}) = \varepsilon.$$

Пусть входной набор  $\tilde{\alpha}$  равен одному из наборов  $(0, 1, 0)$ ,  $(0, 1, 1)$  или  $(1, 1, 0)$ :

$$P_0(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha}) = \varepsilon.$$

Пусть входной набор  $\tilde{\alpha} = (0, 0, 1)$ . Обозначим  $P_1(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha})$  вероятность ошибки программы  $\text{Pr}_{g_2}$ :

$$P_1(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha}) = \varepsilon.$$

Пусть входной набор  $\tilde{\alpha} = (1, 1, 1)$ :

$$P_1(\text{Pr}_{g_2}, \tilde{\alpha}) = \varepsilon.$$

Таким образом,  $N(\text{Pr}_{g_2}) = \varepsilon$ .

**Лемма 2 доказана.**

Программу  $\text{Pr}_{g_2}$  (рис. 5) будем использовать для повышения надежности программ, реализующих произвольные булевы функции.

**Теорема 4.** В полном конечном базисе  $B$ , содержащем  $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2$ , при любом  $n \in N$  любую функцию  $f(x_1, \dots, x_n)$  можно реализовать такой программой  $\text{Pr}_f^{***}$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  справедливо неравенство  $N(\text{Pr}_f^{***}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Доказательство.** Пусть полный конечный базис  $B$  содержит функцию  $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2$ . Пусть  $f(x_1, \dots, x_n)$  – произвольная булева функция,  $n \in N$ . По теореме 1 функции  $\bar{f}$  и  $f$  можно реализовать схемами  $S_1$  и  $S_2$  соответственно, которые при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  функционируют с ненадежностью, не больше  $5\varepsilon + 182\varepsilon^2$ . Обозначим  $P(S_1)$  и  $P(S_2)$  ненадежности схем  $S_1$  и  $S_2$  соответственно. Пусть  $P = \max\{P(S_1), P(S_2)\}$ . Тогда  $P \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$ . Используя схемы  $S_1$  и  $S_2$ , построим для  $f$  неветвящуюся программу  $\text{Pr}_f^{***}$  (рис. 6).

Вычислим и оценим вероятности ошибок на выходе программы  $\text{Pr}_f^{***}$ .

Пусть входной набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 0$ . Обозначим  $P_0(S_1, \tilde{a})$  и  $P_1(S_2, \tilde{a})$  вероятности ошибок схем  $S_1$  и  $S_2$  на входном наборе  $\tilde{a}$ .

Ясно, что  $P_0(S_1, \tilde{a}) \leq P(S_1)$ ,  $P_1(S_2, \tilde{a}) \leq P(S_2)$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_1(\text{Pr}_f^{***}, \tilde{a}) &= (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))^2 (1 - P_1(S_2, \tilde{a})) \cdot 0 + P_0(S_1, \tilde{a}) (1 - P_1(S_2, \tilde{a})) \times \\ &\quad \times (1 - P_0(S_1, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + (1 - P_0(S_1, \tilde{a})) P_1(S_2, \tilde{a}) (1 - P_0(S_1, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + \\ &\quad + (1 - P_0(S_1, \tilde{a})) (1 - P_1(S_2, \tilde{a})) P_0(S_1, \tilde{a}) \cdot 0 + P_0(S_1, \tilde{a}) P_1(S_2, \tilde{a}) \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times (1 - P_0(S_1, \tilde{a})) \cdot (1 - \varepsilon) + P_0(S_1, \tilde{a})(1 - P_1(S_2, \tilde{a}))P_0(S_1, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + \\ & + (1 - P_0(S_1, \tilde{a}))P_1(S_2, \tilde{a})P_0(S_1, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + P_0^2(S_1, \tilde{a})P_1(S_2, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) \leq \\ & \leq 2P(S)\varepsilon + 3P^2(S). \end{aligned}$$

$\text{Pr}_f^{***}$  :

$$\begin{aligned} y_1 &= \bar{f}[S_1] \\ y_2 &= f[S_2] \\ y_3 &= \bar{f}[S_1] \\ z_1 &= \bar{y}_1 \vee \bar{y}_3 \\ &\text{stop}(y_2) \\ z_2 &= y_2 \\ &\text{stop}(y_1) \\ z_3 &= \bar{y}_3 \vee \bar{y}_3 \end{aligned}$$

Рис. 6

Поскольку  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_1(\text{Pr}_f^{***}, \tilde{a}) \leq 90\varepsilon^2. \quad (7)$$

Пусть входной набор  $\tilde{a}$  такой, что  $f(\tilde{a}) = 1$ . Обозначим  $P_1(S_1, \tilde{a})$  и  $P_0(S_2, \tilde{a})$  вероятности ошибок схем  $S_1$  и  $S_2$  на входном наборе  $\tilde{a}$ . Ясно, что  $P_1(S_1, \tilde{a}) \leq P(S_1)$ ,  $P_0(S_2, \tilde{a}) \leq P(S_2)$ . Тогда

$$\begin{aligned} P_0(\text{Pr}_f^{***}, \tilde{a}) &= (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))^2(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + P_1(S_1, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a})) \times \\ & \times (1 - P_1(S_1, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))P_0(S_2, \tilde{a})(1 - P_1(S_1, \tilde{a})) \cdot \varepsilon + \\ & + (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))(1 - P_0(S_2, \tilde{a}))P_1(S_1, \tilde{a}) \cdot \varepsilon + P_1(S_1, \tilde{a})P_0(S_2, \tilde{a})(1 - P_1(S_1, \tilde{a})) \cdot 1 + \\ & + P_1(S_1, \tilde{a})(1 - P_0(S_2, \tilde{a}))P_1(S_1, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + (1 - P_1(S_1, \tilde{a}))P_0(S_2, \tilde{a}) \times \\ & \times P_1(S_1, \tilde{a}) \cdot (1 - \varepsilon) + P_1^2(S_1, \tilde{a})P_0(S_2, \tilde{a}) \cdot 1 \leq \varepsilon + 3P^2(S). \end{aligned}$$

Поскольку  $P(S) \leq 5\varepsilon + 182\varepsilon^2$  и  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ , получаем неравенство

$$P_0(\text{Pr}_f^{***}, \tilde{a}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2. \quad (8)$$

Из неравенств (7) и (8) следует, что ненадежность программы  $N(\text{Pr}_f^{***})$  удовлетворяет неравенству  $N(\text{Pr}_f^{***}) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Теорема 4 доказана.**

### Заключение

Из теорем 2, 3 и 4, учитывая замечание 1, следует теорема 5.

**Теорема 5.** В полном конечном базисе  $B$ , содержащем функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ , любую булеву функцию  $f$  можно реализовать такой программой  $\text{Pr}_f$ , что при всех  $\varepsilon \in (0, 1/960]$  справедливо неравенство  $N(\text{Pr}_f) \leq \varepsilon + 81\varepsilon^2$ .

**Замечание 2.** Утверждение теоремы 5 верно, если полный конечный базис содержит некоторую функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2} \vee \dots \vee x_k^{a_k}$  ( $k \geq 3$ ,  $a_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, \dots, k\}$ ), поскольку, отождествляя некоторые переменные, из нее можно получить функцию вида  $x_1^{b_1} \vee x_2^{b_2}$ ,  $b_1, b_2 \in \{0, 1\}$ .

Из теоремы 5 следует, что в полном конечном базисе, содержащем некоторую функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ , любую булеву функцию  $f$  можно реализовать неветвящейся программой с ненадежностью, не больше  $\varepsilon + 81\varepsilon^2$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ .

Сравним полученный результат с известными результатами [3] для схем из функциональных элементов.

Пусть  $B_3$  – множество всех булевых функций, зависящих от трех переменных  $x_1, x_2, x_3$ , а полный базис  $B \subseteq B_3$ . Обозначим  $G = G_1 \cup G_2 \cup G_3$ , где

$$G_1 = \{x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \vee x_1^{\sigma_1} x_3^{\sigma_3} \vee x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3} \mid \sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3\}\};$$

$$G_2 = \text{Congr}\{x_1^{\sigma_1} x_2^{\sigma_2} \oplus x_3^{\sigma_3} \mid \sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3\}\};$$

$$G_3 = \text{Congr}\{x_1^{\sigma_1} x_2^{\bar{\sigma}_2} \vee x_2^{\sigma_2} x_3^{\sigma_3} \mid \sigma_i \in \{0, 1\}, i \in \{1, 2, 3\}\}.$$

Известно [2], что если полный базис  $B$  содержит функцию  $\varphi \in G$ , в частности функцию голосования  $g(x_1, x_2, x_3) = x_1 x_2 \vee x_2 x_3 \vee x_1 x_3$ , то любую функцию в этом базисе можно реализовать асимптотически оптимальной по надежности схемой из функциональных элементов, ненадежность которой асимптотически равна  $\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Если же полный базис  $B \subseteq B_3 \setminus G$ , то для почти всех функций ненадежность асимптотически оптимальных по надежности схем асимптотически не меньше  $2\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [2].

Например, в базисе  $\{\bar{x}_1(x_2 \vee x_3), x_1 \vee x_2, 1\}$  почти для всех булевых функций можно построить асимптотически оптимальные по надежности схемы с ненадежностью, асимптотически равной  $2\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [3]. В базисе  $B = \{x_1 \& x_2, x_1 \vee x_2, \bar{x}_1\}$  почти все булевы функции можно реализовать асимптотически оптимальными по надежности схемами, функционирующими с ненадежностью, асимптотически равной  $3\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [3]. В базисе  $B = \{\bar{x}_1 \vee x_2, \bar{x}_1\}$  почти все булевы функции можно реализовать асимптотически оптимальными по надежности схемами, функционирующими с ненадежностью, асимптотически равной  $4\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [3]. Например, в базисе

$\{x_1 \vee x_2, \bar{x}_1\}$  почти все булевы функции можно реализовать асимптотически оптимальными по надежности схемами, функционирующими с ненадежностью, асимптотически равной  $5\varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$  [4].

Таким образом, в полном конечном базисе, содержащем некоторую функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ , любую булеву функцию можно реализовать неветвящейся программой, функционирующей с ненадежностью не больше  $\varepsilon + 81\varepsilon^2$  при  $\varepsilon \in (0, 1/960]$ . В то время как асимптотически оптимальные по надежности схемы из функциональных элементов в различных полных базисах  $B \subseteq B_3 \setminus G$ , содержащих функции вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$ ,  $a_1, a_2 \in \{0, 1\}$ , имеют ненадежность, асимптотически равную  $k_B \cdot \varepsilon$  при  $\varepsilon \rightarrow 0$ , константа  $k_B$  зависит от базиса  $B$  и  $k_B \in \{2, 3, 4, 5\}$ .

#### **Список литературы**

1. **Чашкин, А. В.** О среднем времени вычисления значений булевых функций / А. В. Чашкин // Дискретный анализ и исследование операций. – 1997. – Январь–март. – Т. 4. – № 1. – С. 60–78.
2. **Алехина, М. А.** О надежности схем в базисах, содержащих функции не более чем трех переменных / М. А. Алехина, А. В. Васин // Ученые записки Казанского государственного университета. – 2009. – Т. 151. – Кн. 2. – С. 25–35. – (Физико-математические науки).
3. **Васин, А. В.** Асимптотически оптимальные по надежности схемы в полных базисах из трехходовых элементов : дис. ... канд. физико-математических наук / Васин А. В. – Пенза, 2010. – 100 с.
4. **Васин, А. В.** Об асимптотически оптимальных схемах в базисе  $\{x_1 \& x_2, \bar{x}_1\}$  / А. В. Васин // Дискретный анализ и исследование операций. – 2009. – Ноябрь–декабрь. – Т. 16. – № 6. – С. 12–22.

---

**Грабовская Светлана Михайловна**

ассистент, кафедра дискретной математики, Пензенский государственный университет

E-mail: swetazin@mail.ru

---

**Grabovskaya Svetlana Mikhailovna**

Assistant, sub-department of discrete mathematics, Penza State University

---

УДК 519.718

**Грабовская, С. М.**

**О надежности неветвящихся программ в базисе, содержащем функцию вида  $x_1^{a_1} \vee x_2^{a_2}$  / С. М. Грабовская // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 26–38.**

## НЕЛИНЕЙНАЯ ЗАДАЧА О ГИПЕРУПРУГОМ ДЕФОРМИРОВАНИИ ПОЛИЛИНЕЙНОГО КОНЕЧНОГО ЭЛЕМЕНТА ОБОЛОЧКИ СРЕДНЕЙ ТОЛЩИНЫ

*Аннотация.* Предлагается алгоритм решения задачи о больших деформациях гиперупругих оболочек средней толщины с использованием метода конечных элементов. Базовым является тензор деформаций Альманси. Используется физическая модель материала Сетха. Решена тестовая задача.

*Ключевые слова:* оболочечный конечный элемент, гиперупругие деформации, метрический тензор, тензор Альманси, метод двойной аппроксимации.

*Abstract.* The algorithm of the solving of a problem about the large deformations of hyperelastic shells of average thickness with use of a finite elements method is offered. Base is tensor deformations Almansi. The physical model of material of Seth is used. The test problem is solved.

*Keywords:* shell finite element, hyperelastic strains, metric tensor, tensor of Almansi, method of double approximation.

### Введение

В последнее время все чаще исследуют нелинейные задачи теории упругости, в частности задачи теории пластин и оболочек. Работы прошлых десятилетий по данному направлению были резюмированы в [1–3]. Было предложено большое количество методик, в частности теория, численные модификации и обобщения вырожденного оболочечного элемента представлены в [1–4], применение метода сокращенного интегрирования отмечено в работах [1–3, 5] и т.д.

В первой части данной статьи представлены определяющие кинематические соотношения в нелинейной постановке нового восьми-узлового полилинейного изопараметрического конечного элемента (КЭ), где в качестве степеней свободы в рассматриваемом КЭ фигурируют узловые степени свободы на лицевых поверхностях. Определяются ковариантные и контравариантные компоненты метрического тензора, тензоров деформаций (Коши – Грина и Альманси) и истинных напряжений Коши в исходном и текущем состоянии. Используется метод двойной аппроксимации по точкам суперсходимости для устранения «ложных деформаций» поперечного сдвига. Идеино близкие методики были предложены в [1–14].

Вторая часть посвящена использованию вариационного уравнения в скоростях напряжений в актуальной конфигурации. Вывод данного вариационного уравнения описан в [15] и в многочисленных журнальных публикациях. Был рассмотрен материал Сетха, где в качестве тензора конечных деформаций используется тензор деформаций Альманси. Описание этого материала представлено в [16, 17]. Проведена линеаризация данного вариационного уравнения, дискретизация полученных соотношений (матрицы жесткости, матрицы геометрической жесткости). Полученные выражения записываются в виде системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

В третьей части рассматривается тестовая задача изгиба балки в кольцо. Данная задача сначала решается аналитически, исходя из кинематических и

физических соотношений. Далее на данной тестовой задаче апробируется методика, предложенная в предыдущих главах. Приведенный числовой пример демонстрирует возможность настоящей методики в решении нелинейных задач теории оболочек.

### 1. Определяющие соотношения

Определим исходную конфигурацию

$$X^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \sum_{t=1}^8 X_t^i N_t(\xi^1, \xi^2, \xi^3), \quad (1)$$

где  $N_t(\xi^j) = \frac{1}{8}(1 + \xi_t^1 \xi^1)(1 + \xi_t^2 \xi^2)(1 + \xi_t^3 \xi^3)$  – функция формы,  $-1 \leq \xi^1, \xi^2, \xi^3 \leq 1$

По аналогии с [7] получаем

$$\bar{R}_j = \frac{\partial X^i}{\partial \xi^j} \bar{e}_i = R_j^i \bar{e}_i; \quad (2)$$

$$\bar{R}^j = \frac{\partial \xi^j}{\partial X^i} \bar{e}_i = \frac{1}{2\sqrt{G}} \epsilon^{jmn} \bar{R}_m \times \bar{R}_n = R^{j,i} \bar{e}_i, \quad (3)$$

где  $\epsilon^{kmn}$  – символы Леви – Чевита;

$$\sqrt{G} = \bar{R}_1 \cdot [\bar{R}_2 \times \bar{R}_3]; \quad (4)$$

метрический тензор:

$$(G) = G_{ij}(\bar{R}^i \bar{R}^j) = G^{ij}(\bar{R}_i \bar{R}_j) \quad (5)$$

Текущую конфигурацию на  $k$ -м шаге нагружения определим в аналогичном виде:

$${}^k \bar{r} = {}^k x^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3) \bar{e}_i, \quad (6)$$

где

$${}^k x^i(\xi^1, \xi^2, \xi^3) = \sum_{r=1}^8 {}^k x_r^i N_r(\xi^1, \xi^2, \xi^3). \quad (7)$$

Соответственно вычисляем

$${}^k \bar{r}_j = \frac{\partial {}^k x^i}{\partial \xi^j} \bar{e}_i, \quad (8)$$

$${}^k \bar{r}^{j,i} = \frac{\partial {}^k \xi^j}{\partial x^i} \bar{e}_i = \frac{1}{2\sqrt{{}^k g}} \epsilon^{jmn} {}^k \bar{r}_m \times {}^k \bar{r}_n = {}^k r^{j,i} \bar{e}_i; \quad (9)$$

метрический тензор:

$$\left( {}^k g \right) = {}^k g_{ij} \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right) = {}^k g^{ij} \left( {}^k \bar{r}_i {}^k \bar{r}_j \right), \quad (10)$$

где

$${}^k g_{ij} = {}^k \bar{r}_i \cdot {}^k \bar{r}_j = \sum_m \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^j}. \quad (11)$$

Если ввести в рассмотрение ковариантные компоненты, то тензор деформации Альманси записывается следующим образом:

$${}^k Z_{ij} = \frac{1}{2} \left( {}^k g_{ij} - G_{ij} \right) = \frac{1}{2} \sum_m \left( \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^j} - \frac{\partial X^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial X^m}{\partial \xi^j} \right). \quad (12)$$

Так как компоненты тензоров деформаций Коши – Грина и Альманси в криволинейных базисах совпадают между собой, получаем тензор деформаций Коши – Грина

$$\left( {}^k E \right) = {}^k Z_{ij} \left( {}^k \bar{R}^i {}^k \bar{R}^j \right) \quad (13)$$

и тензор деформаций Альманси

$$\left( {}^k A \right) = {}^k Z_{ij} \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right). \quad (14)$$

Введем в рассмотрение вектор приращения перемещений:

$$\Delta {}^k \bar{U} = {}^{k+1} \bar{r} - {}^k \bar{r} = \Delta U^i \left( \xi^1, \xi^2, \xi^3 \right) \bar{e}_i, \quad (15)$$

где используются аппроксимации типа (1), (7), т.е.

$$\Delta {}^k U^i \left( \xi^1, \xi^2, \xi^3 \right) = \sum_n \Delta {}^k U_n^i N_n \left( \xi^1, \xi^2, \xi^3 \right). \quad (16)$$

Аналог тензора пространственного градиента скорости

$$\left( \Delta {}^k h_R \right) = \left( {}^k \Delta \bar{U}_i {}^k \bar{r}^i \right) \quad (17)$$

будет представлен в виде

$$\begin{aligned} \left( \Delta {}^k h_R \right) &= \left( \frac{\partial \Delta {}^k \bar{U}}{\partial \xi^i} {}^k \bar{r}^i \right) = \sum_m \frac{\partial \Delta {}^k U^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^j} \left( {}^k \bar{r}^j {}^k \bar{r}^i \right) = \\ &= \sum_m \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial \Delta {}^k U^m}{\partial \xi^j} \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right) = \Delta {}^k \alpha_{ij} \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right). \end{aligned} \quad (18)$$

Симметричная часть этого тензора имеет вид

$$\left( \Delta {}^k d_R \right) = \frac{1}{2} \sum_m \left[ \frac{\partial \Delta {}^k U^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^j} + \frac{\partial {}^k x^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial \Delta {}^k U^m}{\partial \xi^j} \right] \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right) = \Delta {}^k Z_{ij} \left( {}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j \right). \quad (19)$$

Аналогично можем записать вариации. Имеем

$$(\delta^k d_R) = \frac{1}{2} \sum_m \left[ \frac{\partial \delta U^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial^k x^m}{\partial \xi^j} + \frac{\partial^k x^m}{\partial \xi^i} \frac{\partial \delta U^m}{\partial \xi^j} \right] ({}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j) = \delta^k Z_{ij} ({}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j). \quad (20)$$

Здесь имеют место соотношения

$$\Delta^k \bar{Z}_{ij} = \frac{1}{2} [\Delta^k \alpha_{ij} + \Delta^k \alpha_{ji}], \quad (21)$$

$$\delta^k Z_{ij} = \frac{1}{2} [\delta^k \alpha_{ij} + \delta^k \alpha_{ji}].$$

Тензор истинных напряжений Коши определяется в виде

$$({}^k \sigma) = {}^k \sigma_{ij} ({}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j) = {}^k \sigma^{ij} ({}^k \bar{r}_i {}^k \bar{r}_j),$$

где введены ковариантные и контравариантные компоненты тензора напряжений.

## 2. Алгоритм расчета

Запишем известное вариационное уравнение в скоростях напряжений [6] без учета массовых сил. Это уравнение будет иметь вид

$$\begin{aligned} & \int_{V_k} \left\{ ({}^k \dot{\sigma}) \cdot ({}^k d) + \left[ \frac{\partial^k v^i}{\partial^k x^i} \right] ({}^k \sigma) \cdot ({}^k d) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} ({}^k \sigma) \cdot \left[ ({}^k h) \cdot ({}^k h) + ({}^k h)^T \cdot ({}^k h)^T \right] \right\} dV_k = \\ & = \int_{S_k^\sigma} {}^k \dot{t}_n^* \cdot \delta \bar{U} dS_k - \left\{ \int_{V_k} [({}^k \sigma) \cdot ({}^k d)] dV_k - \int_{S_k^\sigma} \bar{t}_n^* \delta \bar{U} dS \right\}. \quad (22) \end{aligned}$$

Теперь сделаем переход от  $({}^k \dot{\sigma})$  и  ${}^k \dot{t}_n^*$  к приращениям  $(\Delta^k \sigma)$  и  $\Delta^k \bar{t}_n^*$ .

Получим следующее соотношение:

$$\begin{aligned} & \int_{V_k} \left\{ (\Delta^k \sigma) \cdot ({}^k d_R) + \left[ \frac{\partial^k \Delta U^i}{\partial^k x^i} \right] ({}^k \sigma) \cdot ({}^k d_R) - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} ({}^k \sigma) \cdot \left[ ({}^k h_R) \cdot (\Delta^k h_R) + (\Delta^k h_R)^T \cdot ({}^k h_R)^T \right] \right\} dV_k = \\ & = \int_{S_k^\sigma} \Delta^k \bar{t}_n^* \cdot \delta \bar{U} dS_k - \left\{ \int_{V_k} [({}^k \sigma) \cdot ({}^k d_R)] dV_k - \int_{S_k^\sigma} \bar{t}_n^* \cdot \delta \bar{U} dS \right\}. \quad (23) \end{aligned}$$

В качестве физической модели используем материал Сетха, для которого справедлив закон Гука для тензора деформаций Альманси [16, 17]:

$$(\sigma) = 2\mu(A) + \lambda(g)I_{1A}. \quad (24)$$

Распишем для приращений напряжений  $k$ -го состояния:

$$(\Delta^k \sigma) = 2\mu(\Delta^k A) + \lambda({}^k g) \left[ ({}^k g) \cdot (\Delta^k A) \right], \quad (25)$$

где  $(\Delta^k A) = (\Delta^k d_R) - (\Delta^k h_R)^T \cdot ({}^k A) - ({}^k A) \cdot (\Delta^k h_R)$ , либо в дискретном случае, используя (18), (19), можно написать в виде

$$(\Delta^k A) = {}^k Z_{ij} ({}^k \bar{r}^i {}^k \bar{r}^j) - \Delta^k \alpha_{ki} {}^k A_{kj} - {}^k A_{ik} \Delta^k \alpha_{kj}. \quad (26)$$

Распишем первое слагаемое (25):

$$(\Delta^k \sigma^1) = 2\mu(\Delta^k A) = 2\mu \left( (\Delta^k d_R) - (\Delta^k h_R)^T \cdot ({}^k A) - ({}^k A) \cdot (\Delta^k h_R) \right). \quad (27)$$

Используя (14), (18) и (19), запишем (28) в виде

$$\Delta^k \sigma_{ij}^1 = 2\mu \left( \Delta^k Z_{ij} - \Delta^k \alpha_{ki} {}^k A_{kj} - {}^k A_{ik} \Delta^k \alpha_{kj} \right). \quad (28)$$

Учитывая, что

$$({}^k g) \cdot (\Delta^k A) = \sum_{i,j} {}^k g^{ij} \left( \Delta^k Z_{ij} - \Delta^k \alpha_{ki} {}^k A_{kj} - {}^k A_{ik} \Delta^k \alpha_{kj} \right), \quad (29)$$

распишем второе слагаемое (25):

$${}^k \Delta \sigma_{ij}^2 = \lambda \delta_{ij} \sum_{l,n} {}^k g^{ln} \left( \Delta^k Z_{ln} - \Delta^k \alpha_{kl} {}^k A_{kn} - {}^k A_{lk} \Delta^k \alpha_{kn} \right), \quad (30)$$

где

$$\Delta^k Z_{ij} = \sum_m \Delta^k U_r^m {}^k E_{ij}^{rm}; \quad (31)$$

$${}^k E_{ij}^{rm} = \frac{1}{2} {}^k x_t^m \left( \frac{\partial N_r}{\partial \xi^i} \frac{\partial N_t}{\partial \xi^j} + \frac{\partial N_t}{\partial \xi^i} \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} \right). \quad (32)$$

С технологией введения метода двойных аппроксимаций для использованного в настоящей работе КЭ можно ознакомиться в работе [7].

Если ввести обозначения

$${}^k A_{ij}^{rm} = \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} \sum_t {}^k x_t^m \frac{\partial N_t}{\partial \xi^i} = \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} r_m^i, \quad (33)$$

то (32) можно записать в виде

$${}^k E_{ij}^{rm} = \frac{1}{2} \left[ {}^k A_{ij}^{rm} + {}^k A_{ji}^{rm} \right]. \quad (34)$$

Запишем второе слагаемое вариационного уравнения (23). Оно представлено в виде

$$-\frac{1}{2}({}^k\sigma) \cdot \left[ (\delta^k h_R) \cdot (\Delta^k h_R) + (\Delta^k h_R)^T \cdot (\delta^k h_R)^T \right], \quad (35)$$

где

$$({}^k\sigma) = {}^k\sigma_{ij} ({}^k\bar{r}^i {}^k\bar{r}^j), \quad {}^k\sigma_{ij} = \lambda^k g_{ij} {}^k I_{1A} + 2\mu^k A_{ij}, \quad {}^k I_{1A} = {}^k g^{ij} {}^k A_{ij}. \quad (36)$$

Распишем квадратную скобку в (35):

$$\begin{aligned} & \left[ (\delta^k h_R) \cdot (\Delta^k h_R) + (\Delta^k h_R)^T \cdot (\delta^k h_R)^T \right] = \\ & = \left[ \delta^k \alpha_{im} \Delta^k \alpha_{nj} {}^k g^{mn} + \Delta^k \alpha_{mi} \delta^k \alpha_{jn} {}^k g^{nm} \right] = \\ & = \sum_{s,p} \left[ \frac{\partial \delta^k U^s}{\partial \xi^i} \frac{\partial {}^k x^s}{\partial \xi^m} \frac{\partial \Delta^k U^p}{\partial \xi^n} \frac{\partial {}^k x^p}{\partial \xi^j} {}^k g^{mn} + \frac{\partial \Delta^k U^p}{\partial \xi^m} \frac{\partial {}^k x^p}{\partial \xi^i} \frac{\partial \delta^k U^s}{\partial \xi^j} \frac{\partial {}^k x^s}{\partial \xi^n} {}^k g^{nm} \right] = \\ & = \sum_{s,p} \left[ \delta^k U_r^s {}^k x_t^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^i} \frac{\partial N_t}{\partial \xi^m} \Delta^k U_q^p {}^k x_z^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^n} \frac{\partial N_z}{\partial \xi^j} {}^k g^{mn} + \right. \\ & \quad \left. + \Delta^k U_q^p {}^k x_z^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^m} \frac{\partial N_z}{\partial \xi^i} \delta^k U_r^s {}^k x_t^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} \frac{\partial N_t}{\partial \xi^n} {}^k g^{nm} \right] = \\ & = \sum_{s,p} \left[ \Delta^k U_q^p \delta^k U_r^s \left( {}^k x_t^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^i} \frac{\partial N_t}{\partial \xi^m} {}^k x_z^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^n} \frac{\partial N_z}{\partial \xi^j} {}^k g^{mn} + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + {}^k x_z^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^m} \frac{\partial N_z}{\partial \xi^i} {}^k x_t^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} \frac{\partial N_t}{\partial \xi^n} {}^k g^{nm} \right) \right] = \\ & = \sum_{s,p} \left[ \Delta^k U_q^p \delta^k U_r^s \left( {}^k r_m^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^i} {}^k r_j^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^n} {}^k g^{mn} + {}^k r_i^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^m} {}^k r_n^s \frac{\partial N_r}{\partial \xi^j} {}^k g^{nm} \right) \right] = \\ & = \sum_{s,p} \left[ \Delta^k U_q^p \delta^k U_r^s \left( {}^k A_{mi}^{rs} {}^k A_{jn}^{qp} {}^k g^{mn} + {}^k A_{im}^{qp} {}^k A_{nj}^{rs} {}^k g^{nm} \right) \right]. \quad (37) \end{aligned}$$

В результате матрица геометрической жесткости второго слагаемого запишется в виде

$$\hat{D}_{ps}^{qr} = -\frac{1}{2} {}^k\sigma^{ij} \left[ {}^k A_{mi}^{rs} {}^k A_{jn}^{qp} {}^k g^{mn} + {}^k A_{im}^{qp} {}^k A_{nj}^{rs} {}^k g^{nm} \right] \sqrt{g}. \quad (38)$$

Запишем третье слагаемое вариационного уравнения (23):

$$\sum_i \frac{\partial \Delta^k U^l}{\partial {}^k x^l} \left[ {}^k(\sigma) \cdot (\delta^k d) \right] = \sum_l \Delta^k \alpha_{ll} {}^k\sigma_{im} \delta^k Z_{nj} {}^k g^{mn} {}^k g^{ij} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_l \Delta^k \alpha_{ll}^k \sigma_{im}^k \frac{1}{2} (\delta^k \alpha_{nj} + \delta^k \alpha_{jn})^k g^{mn k} g^{ij} = \\
&= \sum_l \frac{\partial \Delta^k U^p}{\partial \xi^l} \frac{\partial^k x^p}{\partial \xi^l} \sigma_{im}^k E_{nj}^{rs} \delta^k U_r^s g^{mn k} g^{ij} = \\
&= \sum_l \Delta^k U_q^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^l} x_z^p \frac{\partial N_z}{\partial \xi^l} \sigma_{im}^k E_{nj}^{rs} \delta^k U_r^s g^{mn k} g^{ij} = \\
&= \sum_l \Delta^k U_q^p r_l^p \frac{\partial N_q}{\partial \xi^l} \sigma_{im}^k E_{nj}^{rs} \delta^k U_r^s g^{mn k} g^{ij} = \\
&= \sum_l \Delta^k U_q^p \delta^k U_r^s A_{ll}^{qp} \sigma_{im}^k E_{nj}^{rs} g^{mn k} g^{ij}. \quad (39)
\end{aligned}$$

Тогда матрица геометрической жесткости третьего слагаемого запишется в виде

$$\tilde{D}_{ps}^{qr} = \sigma_{im}^k A_{ll}^{qp} E_{nj}^{rs} g^{mn k} g^{ij} \sqrt{g}. \quad (40)$$

В результате описанной конечно-элементной дискретизации получим систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

$$[{}^l K] \{ \Delta^l u \} = \{ \Delta^l P \} - \{ {}^l H \}, \quad (41)$$

где  $\{ \Delta^l u \}$  – вектор приращения узловых перемещений;  $[{}^l K]$  – матрица левых частей,  $\{ \Delta^l P \}$  – вектор приращения узловых сил;  $\{ {}^l H \}$  – вектор невязки.

Решая систему линейных алгебраических уравнений (41) и определяя приращения перемещений, находим  $(l+1)$  конфигурацию

$${}^{l+1} y^i = {}^l y^i + \Delta^l u^i \quad (42)$$

и напряжения

$${}^{k+1} \sigma = {}^k \sigma + \Delta^k \sigma. \quad (43)$$

### 3. Тестовая задача

Рассматривается тестовая задача изгиба балки в кольцо (рис. 1).

Рассмотрим радиус-вектор начальной конфигурации:

$$\vec{R} = \alpha \vec{e}_1 + \gamma \vec{e}_2 + \beta \vec{e}_3, \quad (44)$$

где  $0 \leq \alpha \leq L$ ,  $0 \leq \gamma \leq b$ ,  $-\frac{h}{2} \leq \beta \leq \frac{h}{2}$ .

Для деформированной конфигурации (рис. 2) справедливо

$$\vec{r} = \alpha [\sin \varphi \vec{e}_1 + (1 - \cos \varphi) \vec{e}_3] + \gamma \vec{e}_2 + \beta [-\sin \varphi \vec{e}_1 + \cos \varphi \vec{e}_3]. \quad (45)$$

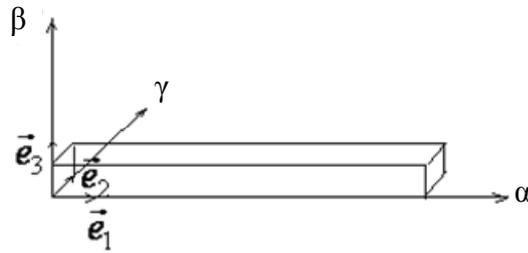


Рис. 1

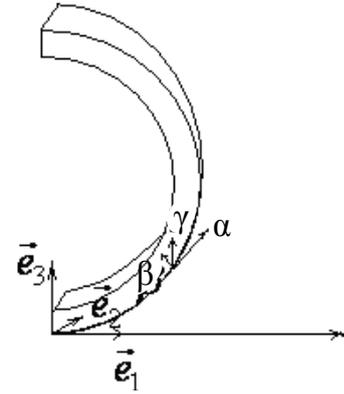


Рис. 2

После очевидных преобразований получим ковариантные и контравариантные компоненты метрического тензора:

$$g_{11} = \left(1 - \frac{\pi\beta}{L}\right)^2; g_{22} = g_{33} = 1; g_{ij} = 0, i \neq j;$$

$$g^{11} = \left(1 - \frac{\pi\beta}{L}\right)^{-2}; g^{22} = g^{33} = 1; g^{ij} = 0, i \neq j.$$

Тогда тензор Альманси будет иметь вид

$$\begin{aligned} A_{11} &= \frac{1}{2}[g_{11} - G_{11}] = \frac{1}{2}\left[\left(1 - \frac{\pi\beta}{L}\right)^2 - 1\right] = \\ &= \frac{1}{2}\left[1 - 2\frac{\pi}{L}\beta + \left(\frac{\pi}{L}\beta\right)^2 - 1\right] = \frac{\pi}{L}\beta\left(-1 + \frac{\pi}{2L}\beta\right). \end{aligned}$$

Остальные  $A_{ij} = 0$ .

Для рассматриваемого материала Сетха справедливы соотношения (36):

$$\sigma_{11} = \lambda g_{11} A_{11} + 2\mu A_{ij};$$

$$I_{1A} = g^{ij} A_{ij};$$

тогда

$$\sigma_{11} = \lambda g_{11} A_{11} + 2\mu A_{11} = A_{11} [2\mu + \lambda g_{11}] = \frac{\pi}{L}\beta\left(\frac{\pi}{L}\beta - 1\right) \left[2\mu + \lambda\left(1 - \frac{\pi}{L}\beta\right)^2\right].$$

Вычислим  $\sigma_{11}^{\min}$  и  $\sigma_{11}^{\max}$  в узлах на свободном краю балки:

$$\sigma_{11}^{\min} = \frac{\pi h}{2L}\left(\frac{\pi h}{4L} - 1\right) \left[2\mu + \lambda\left(1 - \frac{\pi h}{2L}\right)^2\right];$$

$$\sigma_{11}^{\max} = \frac{\pi h}{2L} \left( \frac{\pi h}{4L} + 1 \right) \left[ 2\mu + \lambda \left( 1 + \frac{\pi h}{2L} \right)^2 \right];$$

Для геометрии оболочки учтем  $\frac{\pi h}{4L} \ll 1$ , тогда

$$\sigma_{11}^{\min} = -\frac{\pi h}{2L} (\lambda + 2\mu); \quad \sigma_{11}^{\max} = \frac{\pi h}{2L} (\lambda + 2\mu);$$

$$\sigma_{22} = \lambda g_{22} A_{11} + 2\mu A_{22} = \lambda A_{11} = \lambda \frac{\pi \beta}{L} \left( -1 + \frac{\pi \beta}{2L} \right);$$

$$\sigma_{33} = \lambda g_{33} A_{11} + 2\mu A_{33} = \lambda A_{11} \text{ (с учетом } \sigma_{33} = 0 \text{)}.$$

Задача рассчитана с использованием предложенной выше методики. Длина балки  $L = 200$  см, высота  $h = 1$  см, ширина  $b = 5$  см, модуль упругости

$E = 20000 \frac{\text{кг}}{\text{см}^2}$ , коэффициент Пуассона  $\nu = 0$ . На рис. 3,а приведена балка

при 100 шагах нагружения, на рис. 3,б – при 300 шагах нагружения, на рис. 3,в – при 500 шагах нагружения, на рис. 3,г – при 1000 шагах нагружения. На рис. 4 изображено деформированное состояние балки и несколько промежуточных этапов нагружения.

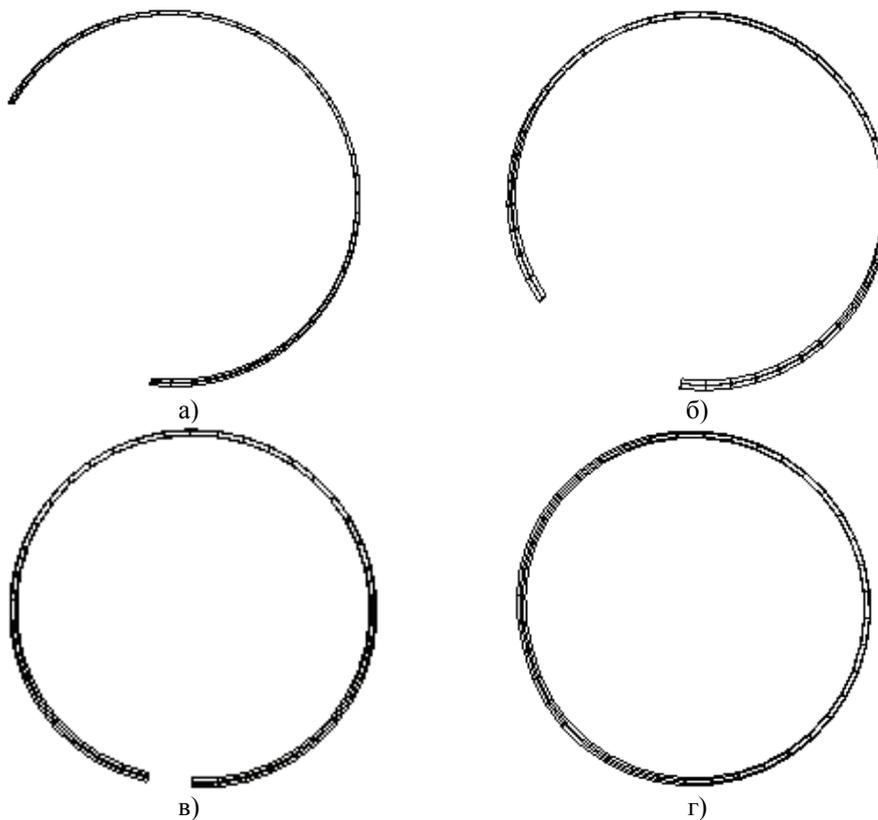


Рис. 3

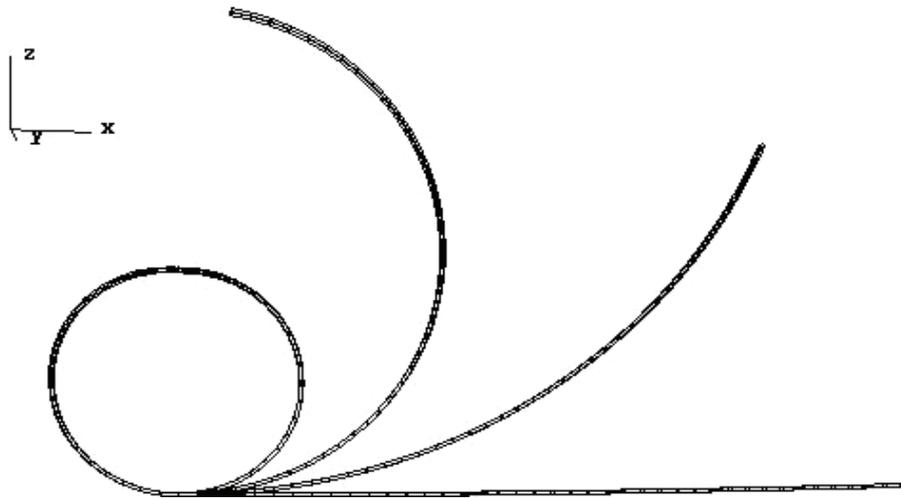


Рис. 4

### Заключение

Предложенная в настоящей работе методика построения трехмерного восьми-узлового изопараметрического КЭ нелинейной теории упругости, использование материала Сетха позволяет получить специальный КЭ, при помощи которого вполне реально рассчитывать оболочки средней толщины с использованием однослойной аппроксимации по толщине. Приведенный числовой пример демонстрирует работоспособность предложенной методики.

### Список литературы

1. Голованов, А. И. Современные конечно-элементные модели и методы исследования тонкостенных конструкций / А. И. Голованов, А. В. Песошин, О. Н. Тюленева. – Казань : КГУ, 2005. – 442 с.
2. Голованов, А. И. Метод конечных элементов в статике и динамике тонкостенных конструкций / А. И. Голованов, О. Н. Тюленева, А. Ф. Шигабутдинов. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2006. – 392 с.
3. Yang, H. T. Y. A survey of recent shell finite elements / H. T. Y. Yang, S. Saigal, A. Masud, R. K. Karania // Int. J. for numerical methods in engineering. – 2000. – V. 47. – P. 101–127.
4. Ahmad, S. Analysis of thick and shell structures by curved finite element / S. Ahmad, B. M. Irons, O. C. Zienkiewicz // International Journal for Numerical Methods in Engineering. – 1990. – V. 2. – P. 419–459.
5. Hughes, T. J. R. Reduced and selective integration techniques in finite element analysis of plates / T. J. R. Hughes, M. Cohen, M. Haroun // Nuclear Engineering and Design. – 1978. – V. 46. – P. 203–222.
6. Голованов, А. И. Трехмерный конечный элемент для расчета тонкостенных конструкций / А. И. Голованов, М. К. Сагдатуллин // Ученые записки Казанского государственного университета. – 2009. – Т. 151. – Кн. 3. – С. 121–129. – (Физико-математические науки).
7. Сахаров, А. С. Метод конечных элементов в механике твердых тел / А. С. Сахаров, В. Н. Кислюцкий, В. В. Киричевский [и др.]. – Киев : Вища школа, 1982. – 480 с.
8. Бережной, Д. В. Искривленный конечный элемент пластин и оболочек средней толщины с учетом обжатия / Д. В. Бережной // Труды XVII междунар. конф. по теории оболочек и пластин. – Казань : Изд-во КГУ, 1996. – Т. 2. – С. 94–99.

9. **Гуриелидзе, М. Г.** Расчет толстостенных оболочек с учетом больших деформаций / М. Г. Гуриелидзе, А. И. Голованов // Труды XVII междунар. конф. по теории оболочек и пластин. – Казань : Изд-во КГУ, 1996. – Т. 2. – С. 118–123.
10. **Голованов, А. И.** Пошаговая постановка решения геометрически нелинейной задачи МКЭ / А. И. Голованов, М. Г. Гуриелидзе // Динамические и технологические проблемы механики конструкций и сплошных сред. – М., 1998. – С. 82–87.
11. **Баженов, В. А.** Моментная схема метода конечных элементов в задачах нелинейной механики сплошной среды / В. А. Баженов, А. С. Сахаров, В. К. Цыхановский // Прикладная механика. – 2002. – Т. 38. – № 6. – С. 24–63.
12. **Kara, N.** Three-dimensional finite element for thick shells of general shape / N. Kara, N. Kumbasar // Int. J. for Physical and Engineering Science. – 2001. – V. 52. – P. 1–7.
13. **Alves de Sousa R. J.** A new one-point quadrature enhanced assumed strain (EAS) solid – shell element with multiple integration points along thickness: Part I – geometrically linear applications / Ricardo J. Alves de Sousa, Rui P. R. Cardoso, Robertt A. Fontes Valente [et al.] // Int. J. for numerical methods in engineering. – 2005. – V. 62. – P. 952–977.
14. **Sze, K. Y.** Three – dimensional continuum finite element models for plate/shell analysis / K. Y. Sze // Prog. Struct. Engng Mater. – 2002. – V. 4. – P. 400–407.
15. **Голованов, А. И.** Математические модели вычислительной нелинейной механики деформируемых сред / А. И. Голованов, Л. У. Султанов. – Казань : Изд-во Казан. гос. ун-та, 2009. – 465 с.
16. **Лурье, А. И.** Нелинейная теория упругости / А. И. Лурье. – М. : Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1980. – 512 с.
17. **Новожилов, В. В.** Основы нелинейной теории упругости / В. В. Новожилов. – М. : ОГИЗ. Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1948. – 212 с.

---

**Голованов Александр Иванович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, Казанский федеральный  
университет

E-mail: Alexandr.Golovanov@ksu.ru

**Golovanov Alexander Ivanovich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor,  
Kazan Federal University

**Сагдатуллин Марат Камилевич**

аспирант, Казанский  
федеральный университет

E-mail: marat1@hitv.ru

**Sagdatullin Marat Kamilevich**

Postgraduate student,  
Kazan Federal University

---

УДК 539.3

**Голованов, А. И.**

**Нелинейная задача о гиперупругом деформировании полилинейного конечного элемента оболочки средней толщины / А. И. Голованов, М. К. Сагдатуллин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 39–49.**

## ПАРАМЕТРИЧЕСКИЕ КОМБИНАТОРНЫЕ ЗАДАЧИ И МЕТОДЫ ИХ ИССЛЕДОВАНИЯ<sup>1</sup>

*Аннотация.* Рассматриваются четыре комбинаторные задачи, параметризованные кратностью  $r$  элемента базового мультимножества: распределение индексов  $vr$ -монотонных перестановок, обобщенные перестановки Гесселя – Стенли и обобщенные частично упорядоченные множества Баклавского – Эдельмана, обобщенные числа Стирлинга и обобщенные частично упорядоченные множества разбиений, обобщенные статистики и обобщенные многочлены Эйлера. Для исследования этих задач привлекаются различные методы.

*Ключевые слова:* мультимножество, статистика, производящая функция,  $vr$ -монотонные перестановки, перестановки Гесселя – Стенли, посеты Баклавского – Эдельмана, числа Стирлинга, посеты разбиений, многочлены Эйлера.

*Abstract.* Four combinatorial problems parametrized by multiplicity  $r$  of an element of base multiset are considered: distribution of indexes  $vr$ -monotonous permutations, the generalized Gessel – Stanley permutations and the generalized Baclawski – Edelman partially ordered sets, the generalized Stirling numbers and the generalized partially ordered sets of the partitions, the generalized statistics and generalized Eulerian polynomials. For research of these problems various methods are involved.

*Keywords:* multiset, statistic, generating function,  $vr$ -monotonous permutations, Gessel – Stanley permutations, Baclawski – Edelman posets, Stirling numbers, posets partitions, Eulerian polynomials.

### Введение

Разнообразие комбинаторных задач заставляет унифицировать методы их описания и исследования. Прогресс в этой области хорошо прослеживается по монографиям [1, 2], в которых анализируется большое число перечислительных задач. Одним из простейших подходов к унификации является исследование семейств комбинаторных задач, зависящих от некоторого параметра. В качестве такого параметра будем рассматривать кратность  $r \geq 1$  каждого элемента мультимножества  $\{1^r, 2^r, \dots, n^r\}$ , которое служит базой для постановки ряда комбинаторных задач. Это мультимножество для краткости будем обозначать  $[n^r]$ , где  $n$  является целым положительным числом.

Все перестановки множества  $[n^r]$  образуют множество  $SP_{n,r}$  мощности  $\#\{\sigma: \sigma \in SP_{n,r}\} = (r!)^{-n} (rn)!$ . Каждую перестановку  $\sigma \in SP_{n,r}$  удобно рассматривать как слово  $\sigma = \sigma_1 \dots \sigma_{rn}$  длины  $|\sigma| = rn$ , причем  $SP_{n,r}$  содержит и зеркальный образ (mirror image)  $mi(\sigma) \in SP_{n,r}$  слова  $\sigma$ , т.е.  $\sigma$ , записанное в обратном порядке. Например, в тождественной перестановке  $\varepsilon \in SP_{n,r}$ , трактуемой как слово  $\varepsilon = 1^r \dots n^r$ , запись  $i^r$ ,  $i \in [n]$ , означает степень символа  $i$ , полученную конкатенацией  $r$  символов  $i$ , а  $mi(\varepsilon) = n^r \dots 1^r$ .

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РГНФ (проект № 09-06-28615 а/В).

На подмножествах перестановок из  $SP_{n,r}$  в комбинаторном анализе часто определяют числовые функции и рассматривают их распределения относительно равномерной меры на этих подмножествах. Такие функции в работах [2, 3] называются статистиками.

При рассмотрении упорядоченных множеств вместо словосочетания «локально конечное частично упорядоченное множество» будем использовать, как и в работе [4], термин «посет», соответствующий английскому сокращению «poset» (partial ordered set).

### 1. Распределение индексов $\nu r$ -монотонных перестановок

В криптографии из перестановки  $\sigma \in SP_{n,r}$  с помощью фиксированного ключа  $\kappa \in SP_{n,r}$  образуют новое слово  $\tau = \tau_1 \dots \tau_{rn}$ ,  $\tau \in T_{n,r}$ ,  $|\tau| = rn$ , над алфавитом  $[n]$  следующим образом:  $\tau = \sigma \oplus \kappa$ , где  $\tau_i = \sigma_i + \kappa_i \pmod{n}$ ,  $i = 1, \dots, rn$ , а  $\tau_i$  является наименьшим положительным вычетом.

Это преобразование, определяющее биекцию  $SP_{n,r}$  на множество слов  $T_{n,r}$ , назовем  $\nu r$ -отображением, т.е.  $\nu r: \sigma \mapsto \tau$  ( $\nu r$  – сокращение словосочетания «vector permutation»). Так как нетривиальные перестановки рассматриваются при  $n \geq 2$ , то в качестве ключа будем фиксировать перестановку  $\varepsilon$  или  $mi(\varepsilon)$ .

**Определение 1.** Назовем слово  $\tau \in T_{n,r}$  монотонным, если все его последовательные символы образуют неубывающую (невозрастающую) последовательность, а соответствующую перестановку  $\sigma = \nu r^{-1}(\tau)$ ,  $\sigma \in SP_{n,r}$ , назовем  $\nu r$ -монотонной перестановкой.

Соответствие между словами  $\tau = \sigma \oplus \varepsilon$  и  $mi(\tau) = mi(\sigma) \oplus mi(\varepsilon)$  позволяет ограничиться рассмотрением только множества  $\text{mon}(SP_{n,r})$   $\nu r$ -монотонно неубывающих перестановок, причем в отображении  $\nu r: \text{mon}(SP_{n,r}) \rightarrow \text{mon}(T_{n,r})$  используется ключ  $\kappa = mi(\varepsilon)$ .

**Определение 2.** Статистику  $ivp(\sigma) = (nr)^{-1} \sum_{i=1}^{rn} \tau_i$ , где  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n,r})$ , а  $\tau = \nu r(\sigma)$ , назовем индексом  $\nu r$ -монотонно неубывающей перестановки.

Эта статистика при  $r=1$  была введена в работе [3]. Она находит среднее значение символа в слове  $\tau = \nu r(\sigma)$  и, несмотря на нерегулярность  $\nu r$ -отображения на множестве  $\text{mon}(SP_{n,r})$ , обладает рядом закономерностей.

**Лемма 1.** а) Индексы  $ivp(\sigma)$  перестановок  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n,r})$  принимают только целые значения  $k = 1, \dots, n$ .

б) Если  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n,r})$  и  $ivp(\sigma) = k$ , то в слове  $\sigma = \xi n^r \eta$  префикс  $\xi$  и суффикс  $\eta$  длины  $|\eta| = r(k-1)$  являются любыми монотонно неубывающими словами такими, что все эти  $\sigma$  могут быть лексикографически упорядочены следующим образом:  $1^r \dots (n-k)^r n^r (n-k+1)^r \dots (n-1)^r, \dots, k^r \dots n^r 1^r \dots (k-1)^r$ .

То есть

**Доказательство.** С помощью равенства  $\tau = \sigma \oplus \kappa$ ,  $\kappa = \text{mi}(\epsilon)$ , для перестановок  $\sigma = k^r \dots n^r 1^r \dots (k-1)^r$  находим  $\tau = k^{rn}$ , поэтому  $\text{ivp}(\sigma)$  принимает значения  $k = 1, \dots, n$ . Пусть  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n,r})$ , а в слове  $\bar{\tau} = \bar{\tau}_1 \dots \bar{\tau}_{nr}$  символы  $\bar{\tau}_i = 1$  при  $\sigma_i + \kappa_i > n$  и  $\bar{\tau}_i = 0$  при  $\sigma_i + \kappa_i \leq n$ . Тогда статистика  $\text{civp}(\sigma) = r^{-1} \sum_{i=1}^{rn} \bar{\tau}_i$  дополнительна к статистике  $\text{ivp}(\sigma)$ , т.е. справедливо равенство  $\text{ivp}(\sigma) + \text{civp}(\sigma) = n + 1$ . Так как слово  $\bar{\tau} = 1^{r(n-k+1)} 0^{r(k-1)}$  для всех перестановок, описанных в лемме 1,б), и эта форма слова  $\bar{\tau}$  сохраняется для любой  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n,r})$ , то лемма 1 доказана.

**Теорема 1.** Пусть  $V_{n,r,k} = \#\{\sigma : \sigma \in \text{mon}(SP_{n,r}), \text{ivp}(\sigma) = k\}$ ,  $k \in [n]$ . Тогда имеет место следующее рекуррентное соотношение:

$$V_{0,r,k} = 0, V_{1,r,k} = \delta_{1k},$$

$$V_{n,r,k} = V_{n-1,r,k} + V_{n-1,r,k-1} + (r-1)V_{n-2,r,k-1}, \quad n \geq 2, k \in \mathbf{Z}, \quad (1)$$

где  $\delta_{ij}$  – символ Кронекера ( $\delta_{ij} = 1$  при  $i = j$  и  $\delta_{ij} = 0$  при  $i \neq j$ ).

**Доказательство.** Применим метод математической индукции. При  $r \geq 1$  равенства  $V_{0,r,k} = 0$ ,  $V_{1,r,k} = \delta_{1k}$  находятся непосредственно. Если для некоторого  $n \geq 2$  соотношение (1) выполнено, то оно выполняется и при  $n+1$ . Действительно, с помощью леммы 1 все слова  $\sigma \in \text{mon}(SP_{n+1,r})$ ,  $\text{ivp}(\sigma) = k$ , можно разбить на следующие блоки: 1) получается вставкой слова  $(n+1)^r$  перед суффиксом длины  $r(k-1)$  в каждое слово  $\pi \in \text{mon}(SP_{n,r})$ ,  $\text{ivp}(\pi) = k$ ; 2) получается вставкой  $(n+1)^r$  перед суффиксом длины  $r(k-1)$  в каждое  $\pi \in \text{mon}(SP_{n,r})$ ,  $\text{ivp}(\pi) = k-1$  и перемещением под слова  $n^r$  в конец слова; 3) получается вставкой  $(n+1)^r$  перед суффиксом длины  $r(k-2)$  в каждое  $\pi \in \text{mon}(SP_{n-1,r})$ ,  $\text{ivp}(\pi) = k-1$ , вставкой  $n^r$  в конец слова и обменом  $i = 1, \dots, r-1$  символом между под словами  $(n-1)^r$ ,  $n^r$  так, чтобы выполнялись условия леммы 1.

Для производящих многочленов  $V_{n,r}(t) = \sum_{k=1}^n V_{n,r,k} t^k$  соотношение (1) позволяет легко найти рекуррентную формулу:

$$V_{0,r}(t) = 0, V_{1,r}(t) = t, V_{n,r}(t) = (1+t)V_{n-1,r}(t) + (r-1)tV_{n-2,r}(t), \quad n \geq 2, \quad (2)$$

которая влечет равенство  $V_{n,r}(t) = t^{n+1}V_{n,r}(t^{-1})$ , показывающее, что  $t^{-1}V_{n,r}(t)$  – возвратный многочлен, иначе  $V_{n,r,k} = V_{n,r,n-k+1}$ .

Производящая функция  $V_r(t, z) = \sum_{n=0}^{\infty} V_{n,r}(t) z^n$  определяется стандартным образом с помощью выражения (2) и оказывается рациональной

$$V_r(t, z) = \frac{tz}{1 - (1+t)z - (r-1)tz^2}, \quad (3)$$

а с помощью разностного уравнения (2) или функции (3) несложно найти явное выражение для многочленов  $V_{n,r}(t)$ :

$$V_{n,r}(t) = \frac{t}{\sqrt{(1-t)^2 + 4rt}} \left( \left( \frac{1+t + \sqrt{(1-t)^2 + 4rt}}{2} \right)^n - \left( \frac{1+t - \sqrt{(1-t)^2 + 4rt}}{2} \right)^n \right), \quad (4)$$

что дает  $V_{n,r}(1) = (2\sqrt{r})^{-1} \left( (1+\sqrt{r})^n - (1-\sqrt{r})^n \right)$  – число  $vr$ -монотонных перестановок. В частности,  $V_{n,1}(1) = 2^{n-1}$ , а  $V_{n,5}(1) = 2^{n-1} F_n$ , где  $F_n$  – числа Фибоначчи.

Разложение функции (3) по степеням  $t$  приводит к выражению

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{k!} V_{n,r,k+1} \frac{z^n}{n!} = \psi(z) \frac{[\varphi_r(z)]^k}{k!}, \quad k \geq 0, \text{ где } \psi(z) = \frac{1}{1-z}, \quad \varphi_r(z) = \frac{z + (r-1)z^2}{1-z},$$

а  $\psi(0) \neq 0$ ,  $\varphi_r(0) = 0$ ,  $\varphi_r'(0) \neq 0$ , т.е., по терминологии Л. М. Коганова [4], последовательность чисел  $\{k!^{-1} n! V_{n,r,k+1}\}$  является псевдопорождаемой с порождающей функцией  $\varphi_r(z)$  и образующей  $\psi(z)$ .

Псевдопорождаемые последовательности и производящие функции являются мощными инструментами решения ряда задач перечислительной комбинаторики [4, 5]. Таким образом, соотношения (2)–(4) дают исчерпывающее описание многочленов  $V_{n,r}(t)$  и их коэффициентов  $V_{n,r,k}$ , определяющих распределение индексов  $vr$ -монотонных перестановок.

Следующее утверждение позволяет использовать вероятностные методы работы [3] для получения асимптотики чисел  $V_{n,r,k}$  при  $n \rightarrow \infty$ .

**Теорема 2.** *Многочлены  $t^{-1}V_{n-1,r}(t)$  и  $t^{-1}V_{n,r}(t)$  ( $n \geq 2$ ) образуют положительную пару, иначе все их нули – различные отрицательные числа, взаимно разделяющие друг друга, т.е. между любыми двумя нулями многочлена  $t^{-1}V_{n,r}(t)$  имеется один нуль многочлена  $t^{-1}V_{n-1,r}(t)$ .*

**Доказательство.** В промежутке  $(-\infty, 0]$  последовательность  $\{t^{-1}V_{k,r}(t)\}_{k=1}^n$  образует ряд многочленов Штурма, что следует из соотношения (2). Разность числа перемен знаков в значениях многочленов этого ряда, вычисленных при  $t = -\infty$  и  $t = 0$ , равна  $n-1$ , что и доказывает теорему 2.

## 2. Обобщенные ГС-перестановки и обобщенные БЭ-посеты

При изучении полиномиальных последовательностей Стирлинга обоих родов И. Гесселем и Р. Стенли в [6] были определены специальные перестановки множества  $[n^2]$ , которые в [7] названы ГС-перестановками.

**Определение 3.** Обобщенной ГС-перестановкой будем называть слово  $\sigma \in SP_{n,r}$ ,  $r \geq 1$ , обладающее ГС-свойством: все буквы слова  $\sigma$ , стоящие между любыми двумя вхождениями символа  $i \in [n]$ , не меньше этого  $i$ .

Под определение 3 при  $r=1$  подходят обычные перестановки, а при  $r=2$  – перестановки Гесселя – Стенли. Множество всех обобщенных ГС-перестановок  $\sigma \in SP_{n,r}$  обозначим  $GS_{n,r}$ . В работе [8] рассмотрены некоторые свойства обобщенных эйлеровых статистик на множестве  $GS_{n,r}$ .

По определению 3 легко строится итерационный алгоритм генерации  $GS_{n+1,r}$ , основанный на нахождении  $(r+1)$ -го слова из  $GS_{n+1,r}$  путем вставки  $(n+1)^r$  в выбранное слово  $\pi \in GS_{n,r}$ , а  $\#\{\sigma : \sigma \in GS_{n+1,r}\} = 1 \cdot (r+1) \cdot \dots \cdot (rn+1)$ .

**Определение 4.** Фиксируя  $r \geq 1$  и  $n \geq 1$ , сформируем множество  $\bar{P}_{n,r}$  всех подмножеств  $\{i_1, i_2, \dots, i_{rk}\} \subset \mathbf{Z}$  таких, что  $0 < i_1 < i_2 < \dots < i_{rk} < rn+1$ ,  $k \in [n]$ , а числа  $i_1, i_2 - i_1, \dots, i_{rk} - i_{rk-1}$  имеют вид  $rj+1$ ,  $j=0,1,\dots$ . Упорядоченное по включению множество  $\bar{P}_{n,r}$  будем называть обобщенным БЭ-посетом.

Под определение 4 при  $r=1$  подходит булева решетка  $B_n$ , а при  $r=2$  – посет К. Баклавского и П. Эдельмана, описанный в [2].

Диаграмма Хассе посета  $\bar{P}_{n,r}$  строится на базе множества  $[rn]$  – максимальный (единичный) элемент. На первом шаге все покрываемые им множества находятся по определению 4 вычеркиванием любых  $r$  рядом стоящих элементов  $[rn]$ , что можно выполнить  $r(n-1)+1$  способом. Если на  $k$ -м шаге все вершины  $y$  диаграммы Хассе построены, то покрываемые ими вершины  $x < y$  также находятся вычеркиванием из каждого множества  $y$  любых  $r$  рядом стоящих его элементов. Пустое множество  $\emptyset$  служит минимальным (нулевым) элементом.

Таким образом, посет  $\bar{P}_{n,r}$  имеет единственную ранговую функцию  $\rho : \bar{P}_{n,r} \rightarrow [n]$ , для которой  $\rho(\emptyset) = 0$ ,  $\rho([rn]) = n$ . Так как все максимальные цепи посета  $\bar{P}_{n,r}$  имеют одинаковую длину  $n$ , то множество  $\bar{P}_{n,r}$  градуированное, а число максимальных цепей равно  $(r(n-1)+1) \cdot \dots \cdot (r+1) \cdot 1$ .

Определим посет  $P_{n,r}$ , диаграмма Хассе которого строится так же, как и для посета  $\bar{P}_{n,r}$ , но ее вершинами являются слова, а не множества, причем слово  $\varepsilon = 1^r \dots n^r$  заменяет базовое множество  $[rn] = \{1, 2, \dots, rn\}$ .

**Лемма 2.** *Посеты  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  изоморфны.*

**Доказательство.** Построение диаграмм Хассе посетов  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  показывает, что достаточно задать биекцию между словом  $\varepsilon = \varepsilon_1 \dots \varepsilon_{rn}$  и мно-

жеством  $[rn] = \{i_1, \dots, i_{rn}\}$ . Она определяется формулами  $i_k = r(\epsilon_k - 1) + m$ ,  $k = 1, \dots, rn$ , где  $m$  – наименьший положительный вычет числа  $k$  по  $\text{mod } r$ . Отметим, что эта биекция позволяет преобразовать каждое слово  $\sigma \in GS_{n,r}$  в слово  $\bar{\sigma} \in \overline{GS}_{n,r}$ .

По лемме 2 число максимальных цепей в посетах  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  одинаково и совпадает с

$$\text{card } GS_{n,r} = \text{card } \overline{GS}_{n,r} = r^n \frac{\Gamma(n + r^{-1})}{\Gamma(r^{-1})},$$

где  $\Gamma(z)$  – гамма-функция.

Покажем, что существует алгоритм маркировки каждой максимальной цепи посетов  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  соответствующими словами  $\sigma \in GS_{n,r}$  и  $\bar{\sigma} \in \overline{GS}_{n,r}$ .

Переход от вершины  $y \in \bar{P}_{n,r}$  ранга  $(n - k)$  диаграммы Хассе к вершине  $x \in \bar{P}_{n,r}$ ,  $x < y$ , ранга  $n - k - 1$ ,  $k = 0, \dots, n - 1$ , состоит в вычеркивании  $r$  рядом стоящих элементов множества  $y$ . Считая, что вычеркнутые числа задают номера символов в слове  $\sigma = \sigma_1, \dots, \sigma_{rn}$ , вставим на эти  $r$  мест символы  $(n - k)$ . Тогда при переходе от единицы  $[rn]$  к нулю  $\emptyset$  посета  $\bar{P}_{n,r}$  найдем слово  $\sigma \in GS_{n,r}$ , которое легко преобразуется в слово  $\bar{\sigma} \in \overline{GS}_{n,r}$ . Так как этим методом находятся все перестановки  $\sigma \in GS_{n,r}$ , то построен второй алгоритм генерации  $GS_{n,r}$ .

В рангово-производящей функции  $U_{n,r}(t) = \sum_{k=0}^n U_{n,r,k} t^k$  коэффициенты  $U_{n,r,k}$  называются числами Уитни второго рода [2].

**Теорема 3.** Для посетов  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  числа Уитни второго рода

$$U_{n,r,k} = \binom{n + (r - 1)k}{rk}. \tag{5}$$

*Доказательство.* На шаге  $k = 0, 1, \dots, n$  вершины диаграммы Хассе посета  $\bar{P}_{n,r}$  находятся вычеркиванием  $rk$  элементов из множества  $[rn]$  так, чтобы в результате было не более  $k$  пробелов. Поэтому на  $k$ -м шаге имеем  $\binom{r(n - k) + k}{r(n - k)}$  вершин, а замена  $k$  на  $(n - k)$  окончательно дает выражение (5).

Для вычисления общего числа элементов посетов  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  введем производящую функцию  $U_r(t, z) = \sum_{n=0}^{\infty} U_{n,r}(t) z^n$ , полагая  $U_{0,r}(t) = 1$ .

**Теорема 4.** Функция  $U_r(t, z)$  рациональна и имеет вид

$$U_r(t, z) = \frac{(1-z)^{r-1}}{(1-z)^r - tz}. \quad (6)$$

**Доказательство.** Подставляя в  $U_r(t, z)$  выражение (5), изменяя порядок суммирования и заменяя  $n$  на  $n+k$ , получим

$$U_r(t, z) = \sum_{k=0}^{\infty} (tz)^k \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+rk}{rk} z^n.$$

Затем, применяя тождество

$$\frac{1}{(1-z)^{m+1}} = \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+m}{m} z^n,$$

окончательно приходим к формуле (6).

Обобщенные многочлены Фибоначчи  $F_{n,r}(t)$  можно определить рекуррентным соотношением:

$$F_{0,r}(t) = \dots = F_{r-2,r}(t) = 0, \quad F_{r-1,r}(t) = 1, \quad F_{n,r}(t) = tF_{n-1,r}(t) + F_{n-r,r}(t), \quad n \geq r.$$

Их производящая функция  $F_r(t, z) = \sum_{n=0}^{\infty} F_{n,r}(t) z^n$  легко вычисляется  $F_r(t, z) = z^{r-1}(1-tz-z^r)^{-1}$ , а разложение  $F_r(1, z) = z^{-1} \sum_{k=1}^{\infty} (z^r(1-z)^{-1})^k$  показывает, что  $F_{n-1,r}(1)$  равно числу композиций  $n$ , все части которых не меньше  $r$  [9].

Так как для производящей функции (6) справедливо равенство

$$U_r(t, z) = r^{-1} \sum_{k=1}^r (1 - (e^{2\pi i k} tz)^{1/r} - z)^{-1}, \quad i = \sqrt{-1},$$

связывающее ее с функцией  $(1-tz-z^r)^{-1}$ , то  $U_{n,r}(t) = F_{r(n+1)-1,r}(t^{1/r})$ , а общее число элементов посетов  $P_{n,r}$  и  $\bar{P}_{n,r}$  равно  $U_{n,r}(1) = F_{r(n+1)-1,r}(1)$ .

Посет  $\bar{P}_{n,r}$  однороден в смысле [2], и матрицы  $(U_{n,r,k})_{n,k=0}^m$ ,  $(u_{n,r,n-k})_{n,k=0}^m$  взаимно обратны ( $u_{n,r,k}$  называется  $k$ -м числом Уитни первого рода).

Разложение функции (6) по степеням  $t$  приводит к псевдопорождаемой последовательности  $\{k!^{-1} n! U_{n,r,k}\}$  с порождающей функцией  $\Phi_r(z) = z(1-z)^{-r}$  и образующей  $\psi(z) = (1-z)^{-1}$ . Если  $\Phi_r = \Phi_r(w)$ ,  $\Phi_r(0) = 0$  – решение уравнения  $\Phi_r = w(1-\Phi_r)^r$ , то паре  $(\psi(z), \Phi_r(z))$  отвечает пара  $([\psi(\Phi_r(w))]^{-1}, \Phi_r(w))$ , задающая псевдопорождаемую последова-

тельность, обратную данной [4]. В частности, при  $k=0$  получим последовательность  $\{n!u_{n,r,n}\}$ , позволяющую вычислить функцию Мебиуса

$$\mu_{n,r} = \mu(0,1) = u_{n,r,n} \text{ посета } \bar{P}_{n,r}.$$

В рассматриваемом случае по теореме Лагранжа [5] находим

$$\Phi_r(w) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{w^n}{n!} \left[ \frac{d^{n-1}(1-z)^{rn}}{dz^{n-1}} \right]_{z=0}, \text{ а } [\psi(\Phi_r(w))]^{-1} = 1 - \Phi_r(w),$$

что устанавливает связь функции  $\mu_{n,r}$  с числами Фусса – Каталана  $C_{n,r}$

$$\mu_{n,r} = (-1)^n C_{n,r}, \quad C_{n,r} = \frac{1}{(r-1)n+1} \binom{rn}{n},$$

комбинаторный смысл которых подробно рассматривается в [10]. Число плоских деревьев с висячим корнем и с  $(r-1)n+1$  некорневыми вершинами, имеющими степень, сравнимую с 1 по  $\text{mod}(r-1)$ , также равно  $C_{n,r}$  [5].

### 3. Обобщенные числа Стирлинга и обобщенные посеты разбиений

Известно, что общие задачи размещения и занятости для случая одинаковых ячеек весьма сложны [1]. Поставим задачу о нахождении числа способов  $S_{n,r,k}$  размещения  $n$  объектов с номерами  $1, \dots, n$  по  $k$  одинаковым ячейкам с упорядочением уровня  $r$  при условии, что ни одна из них не остается пустой.

При  $r=0$  упорядочение отсутствует и  $S_{n,0,k} = S_{n,k}$ , где  $S_{n,k}$  – числа Стирлинга второго рода; при  $r=1$  объекты в ячейках упорядочены и  $S_{n,1,k} = \frac{n!}{k!} \binom{n-1}{k-1}$  – числа Лаха без знака [1]. При упорядочении уровня  $r \geq 1$  каждый объект, помещенный в ячейку, копируется  $r$  раз, а слова, составленные из номеров объектов каждой ячейки, обладают ГС-свойством.

Используя индукцию по  $n$ , приходим к рекуррентному соотношению

$$S_{0,r,k} = \delta_{0k}, \quad S_{n,r,k} = (r(n-1) + k)S_{n-1,r,k} + S_{n-1,r,k-1}, \quad n \geq 1, \quad k \in \mathbf{Z}, \quad (7)$$

поэтому будем называть  $S_{n,r,k}$  обобщенными числами Стирлинга второго рода.

Каждому рассмотренному размещению при  $r=0$  отвечает обычное разбиение множества  $[n]$ , а при  $r \geq 1$  разбиение множества  $[n^r]$  на упорядоченные блоки, обладающие ГС-свойством, причем  $S_{n,r,1} = \#\{\sigma : \sigma \in GS_{n,r}\}$ .

**Определение 5.** Пусть  $\Pi_{n,r}$  – множество всех разбиений  $[n^r]$  типа, определенного значением  $r \geq 0$ . Обобщенным посетом разбиений  $\Pi_{n,r}$  назовем частично упорядоченное по измельчению множество  $\Pi_{n,r}$ , для которого  $\pi \leq \sigma$ , если каждый упорядоченный блок  $\pi$  содержится в упорядоченном блоке  $\sigma$ .

Например, по этому определению в посете  $\Pi_{3,2}$  упорядоченное разбиение  $\{122331\}$  покрывает три разбиения  $\{11\}, \{2233\}; \{22\}, \{1331\}; \{33\}, \{1221\}$ .

Из определения 5 следует, что посет  $\Pi_{n,r}$  – градуированное множество ранга  $(n-1)$ , а  $\rho(\pi) = n - |\pi|$ , где  $|\pi|$  – число блоков разбиения  $\pi$ , причем при  $r \geq 1$  этот посет не содержит единицы. С помощью (7) несложно проверить, что многочлен  $S_{n,r}(t) = \sum_{k=1}^n S_{n,r,k} t^k$ , связанный с рангово-производящей функцией посета  $\Pi_{n,r}$  формулой  $t^n S_{n,r}(t^{-1})$ , удовлетворяет рекуррентному соотношению

$$S_{0,r}(t) = 1, S_{n,r}(t) = (r(n-1) + t)S_{n-1,r}(t) + tS'_{n-1,r}(t), n \geq 1, \quad (8)$$

т.е.  $S_{n,r,n-k}$  –  $k$ -е число Уитни второго рода посета  $\Pi_{n,r}$ .

**Теорема 5.** Для многочленов  $S_{n,r}(t)$  справедлива формула

$$S_{n,r}(t) = e^{-t} (t^{-rn} H_r^n) e^t, H_r = t^{r+1} \frac{d}{dt}, \quad (9)$$

а производящая функция  $S_r(t, z) = \sum_{n=0}^{\infty} S_{n,r}(t) n!^{-1} z^n$  имеет вид

$$S_0(t, z) = \exp(t(e^z - 1)), S_r(t, z) = \exp(t((1 - rz)^{-1/r} - 1)) \text{ при } r \geq 1, \quad (10)$$

где используется главное значение функции  $(1 - rz)^{-1/r}$ .

**Доказательство.** Формула  $S_{n,r}(t) = t^{-rn} e^{-t} (t^{r+1} d/dt)(t^{r(n-1)} e^t S_{n-1,r}(t))$  следует из (8), а ее итерирование дает (9). Сравнение левых и правых частей в выражениях (10) с применением (9), тождества

$$(t^{-rn} H_r^n) t^k = k(k+r) \dots (k+r(n-1)) t^k$$

и разложений в степенные ряды функций  $e^z$  и  $(1 - rz)^{-1/r}$  приводит к (10).

Из доказательства теоремы 5 также вытекает, что последовательности  $\{S_{n,0,k}\}$  и  $\{S_{n,r,k}\}$ ,  $r \geq 1$ , порождаемы с порождающими функциями  $\Phi_0(z) = e^z - 1$  и  $\Phi_r(z) = (1 - rz)^{-1/r} - 1$  соответственно (образующие равны единице).

Порождающие функции  $\Phi_0(w) = \ln(1+w)$  и  $\Phi_r(w) = r^{-1}(1 - (1+w)^{-r})$ ,  $r \geq 1$ , обратны к  $\Phi_0(z)$  и  $\Phi_r(z)$  соответственно. Согласно [4] они порождают последовательность чисел  $\{s_{n,r,k}\}$ , обратную последовательности  $\{S_{n,r,k}\}$ . Числа  $s_{n,r,k}$  являются обобщением чисел Стирлинга первого рода, так как  $s_{n,0,k} = s_{n,k}$ , где  $s_{n,k}$  – обычные числа Стирлинга первого рода [1].

Многочлен  $s_{n,r}(v) = \sum_{k=1}^n s_{n,r,k} v^k$  связан с характеристическим многочленом [2] посета  $\Pi_{n,r}$  формулой

$$v^n s_{n,r}(v^{-1}) = \sum_{\pi \in \Pi_{n,r}} \mu(0, \pi) v^{n-\rho(\pi)},$$

т.е.  $s_{n,r,n-k}$  –  $k$ -е число Уитни первого рода этого посета.

С помощью порождающих функций  $\Phi_0(w)$  и  $\Phi_r(w)$  несложно найти производящие функции  $s_r(v, w) = \sum_{n=0}^{\infty} s_{n,r}(v) n!^{-1} w^n$ ,  $r \geq 0$ ,

$$s_0(v, w) = \sum_{k=0}^{\infty} (\Phi_0(w))^k k!^{-1} v^k = (1+w)^v,$$

$$s_r(v, w) = \sum_{k=0}^{\infty} (\Phi_r(w))^k k!^{-1} v^k = \exp\left[r^{-1}v\left(1 - (1+w)^{-r}\right)\right] \text{ при } r \geq 1. \quad (11)$$

При  $r \geq 0$  формулы (11) влекут рекуррентное соотношение

$$s_{0,r,k} = \delta_{0k}, \quad s_{n,r,k} = s_{n-1,r,k-1} - (n+rk-1)s_{n-1,r,k}, \quad n \geq 1, \quad k \in \mathbf{Z},$$

с помощью которого легко вычисляется

$$\mu_{n-1,r} = s_{n,r,1} = (-1)^{n-1} (r!)^{-1} (n+r-1)! -$$

функция Мебиуса посета  $\Pi_{n,r}$ .

Отметим, что числа  $S_{n,r,k}$  были введены Л. Комте для действительного параметра  $r$  при рассмотрении действия оператора  $H_r^n$  из (9) на функцию  $f(t)$  [4], где также доказано соотношение  $S_{n,r,k} = \sum_{j=k}^n (-r)^{n-j} s_{n,j} S_{j,k}$ .

Сравнение выражений (10) и (11) для действительного параметра  $r \neq 0$  дает соотношение  $s_{n,r}(v) = (-r)^n S_{n,r-1}(-r^{-1}v)$ , а из первой формулы (11) получаем известное выражение  $s_{n,0}(v) = v(v-1)\dots(v-n+1)$ . С помощью теоремы 5 по индукции можно показать, что многочлены  $t^{-1}S_{n-1,r}(t)$  и  $t^{-1}S_{n,r}(t)$ , ( $n \geq 2$ ) также образуют положительную пару аналогично результату теоремы 2.

#### 4. Обобщенные статистики и обобщенные многочлены Эйлера

В работе [11] исследован ряд статистик на группе перестановок. Расширим действие некоторых из них на множество  $GS_{n,r}$ . Число подъемов перестановки является одной из простейших ее характеристик. Для перестановки  $\sigma \in GS_{n,r}$  число подъемов  $\text{rise}(\sigma) = \#\{i : \sigma_i < \sigma_{i+1}, 0 \leq i \leq rn-1, \sigma_0 = 0\}$ , причем статистика  $\text{crise}(\sigma) = \#\{i : \sigma_i > \sigma_{i+1}, 1 \leq i \leq rn, \sigma_{rn+1} = 0\}$ , вычисляющая число спусков перестановки  $\sigma \in GS_{n,r}$ , дополнительна к  $\text{rise}(\sigma)$ , т.е.  $\text{rise}(\sigma) + \text{crise}(\sigma) = n+1$  [8].

**Определение 6.** Код Лемера  $\xi = l(\sigma)$  перестановки  $\sigma \in GS_{n,r}$  зададим словом  $\xi = \xi_1, \dots, \xi_{rn}$  с буквами  $\xi_1 = 0$ ,  $\xi_i = \#\{j : \sigma_j < \sigma_i, 1 \leq j \leq i-1\}$ ,  $i = 2, \dots, rn$ , а статистику  $\text{imal}(\sigma) = \text{ima}(\xi)$ , где  $\text{ima}(\xi)$  – число различных букв (integer make) в слове  $\xi$ , будем называть по аналогии с [11] обобщенной статистикой Дюмона.

**Лемма 3.** *Отображение  $l : \sigma \mapsto \xi$  биективно.*

**Доказательство.** По определению 6 перестановке  $\sigma \in GS_{n,r}$  соответствует слово  $\xi$  с числом вхождений каждого символа, кратным  $r$ , причем позиции возрастаний в словах  $\sigma$  и  $\xi$  совпадают. В соответствии с определением 6 для восстановления по  $\xi$  слова  $\sigma \in GS_{n,r}$  будем заполнять пустые (пронумерованные) позиции искомого слова  $\sigma$  по следующему алгоритму.

Если  $\xi$  содержит символы, отличные от 0, то на  $k$ -м шаге,  $k = 1, 2, \dots$ , в слове  $\xi$  находится подслово  $m^r$  с таким первым символом  $m = \xi_i$ , что при  $m = i - rj - 1$ ,  $j = 0, 1, \dots$ , величина  $n - k - j + 1$  максимальна. Затем на  $r$  не заполненных ранее позициях слова  $\sigma$  записываются символы  $n - k - j + 1$ , начиная с  $i$ -й позиции. Вычеркивая из  $\xi$  найденное подслово  $m^r$ , получаем новое слово  $\bar{\xi}$  длины  $|\bar{\xi}| = |\xi| - r$ . Затем полагаем  $\xi = \bar{\xi}$  и переходим к шагу  $k + 1$ .

Если  $\xi$  содержит все символы, равные 0, то на оставшиеся пустые позиции слова  $\sigma$  записываются неиспользованные ранее символы алфавита  $[n]$  кратностью  $r$  в порядке убывания их величины.

Итак, по слову  $\xi$  сформирована единственная перестановка  $\sigma \in GS_{n,r}$ .

**Определение 7.** Числа  $A_{n,r,k} = \#\{\sigma : \sigma \in GS_{n,r}, \text{rise}(\sigma) = k\}$ ,  $k \in [n]$ , назовем обобщенными числами Эйлера.

При  $r = 1$  по определению 7 получаем обычные числа Эйлера  $A_{n,k}$ .

**Теорема 6.** а) Числа  $A_{n,r,k}$  удовлетворяют рекуррентному соотношению

$$A_{0,r,k} = \delta_{0k}, A_{n,r,k} = kA_{n-1,r,k} + (r(n-1) - k + 2)A_{n-1,r,k-1}, n \geq 1, k \in \mathbf{Z}. \quad (12)$$

$$\text{б) } A_{n,r,k} = \#\{\sigma : \sigma \in GS_{n,r}, \text{imal}(\sigma) = k\}, k \in [n].$$

**Доказательство.** В соответствии с определением 7 и теоремой 6,б  $\text{rise}$  и  $\text{imal}$  являются обобщенными эйлеровыми функциями (E-статистиками), определяемыми выражением  $A_{n,r,k} = \#\{\sigma : \sigma \in GS_{n,r}, E(\sigma) = k\}$ ,  $k \in [n]$ . Поэтому для доказательства теоремы 6 следует с помощью статистик  $\text{rise}$  и  $\text{imal}$  получить формулу (12). При  $n = 1$  эта формула проверяется непосредственно. Пусть по индукционному предположению для перестановок  $\tau \in GS_{n-1,r}$  и статистик  $\text{rise}$ ,  $\text{imal}$  числа  $A_{n-1,r,k}$  могут быть вычислены с помощью (12). Тогда для доказательства (12) для чисел  $A_{n,r,k}$  рассмотрим два случая:

1) Если  $A_{n-1,r,k} = \#\{\tau : \tau \in GS_{n-1,r}, E(\tau) = k\}$ , то вставить слово  $n^r$  в слова  $\{\tau : \tau \in GS_{n-1,r}, \text{rise}(\tau) = k\}$  без изменения числа подъемов  $\text{rise}(\tau) = k$

можно ровно  $k$  способами, вставляя его в  $\tau \in GS_{n-1,r}$  между буквами  $\tau_i, \tau_{i+1}$ , для которых  $\tau_i < \tau_{i+1}, 0 \leq i \leq r(n-1) - 1$ . Аналогично  $k$  способами можно вставить слово  $n^r$  в слова  $\{\tau: \tau \in GS_{n-1,r}, \text{imal}(\tau) = k\}$  без изменения числа  $\text{ima}(\xi) = k$ , вставляя его в  $\tau \in GS_{n-1,r}$  на первом месте или между двумя буквами  $\tau_i, \tau_{i+1}, 1 \leq i \leq r(n-1) - 1$ , для которых в слове  $\xi = l(\tau)$  имеем  $\xi_j \neq \xi_{j+1}, 1 \leq j \leq i$ .

2) Если  $A_{n-1,r,k} = \#\{\tau: \tau \in GS_{n-1,r}, E(\tau) = k - 1\}$ , то вставить слово  $n^r$  в слова  $\{\tau: \tau \in GS_{n-1,r}, \text{rise}(\tau) = k - 1\}$  с изменением числа подъемов  $\text{rise}(\tau) = k - 1$  на  $k$  можно  $r(n-1) - k + 2$  способами, вставляя его в  $\tau \in GS_{n-1,r}$  на последнем месте или между двумя такими буквами  $\sigma_i, \sigma_{i+1}$ , что  $\tau_i \geq \tau_{i+1}, 0 \leq i \leq r(n-1) - 1$ . Аналогично,  $r(n-1) - k + 2$  способами можно вставить слово  $n^r$  в слова  $\{\tau: \tau \in GS_{n-1,r}, \text{imal}(\tau) = k - 1\}$  с изменением числа  $\text{ima}(\xi) = k - 1$  на  $k$ , вставляя его в слово  $\tau \in GS_{n-1,r}$  на последнем месте или между двумя буквами  $\tau_i, \tau_{i+1}, 1 \leq i \leq r(n-1) - 1$ , для которых в слове  $\xi = l(\tau)$  имеем  $\xi_j = \xi_{j+1}, 1 \leq j \leq i$ .

Таким образом, если соотношение (12) выполняется для перестановок  $\tau \in GS_{n-1,r}$ , то оно выполняется и для перестановок  $\sigma \in GS_{n,r}$ .

С помощью формулы (12) для обобщенных многочленов Эйлера  $A_{n,r}(t) = \sum_{k=1}^n A_{n,r,k} t^k$  проверяется рекуррентное соотношение

$$A_{0,r}(t) = 1, A_{n,r}(t) = (r(n-1) + 1)t A_{n-1,r}(t) + t(1-t)A'_{n-1,r}(t), n \geq 1, \quad (13)$$

которое при  $r=1$  определяет обычные многочлены Эйлера  $A_n(t)$ , а также легко позволяет вычислить  $A_{n,r}(1) = \#\{\sigma: \sigma \in GS_{n,r}\}$ .

В работе [2] многочлен  $Q(t)$  называется  $f$ -эйлеровым, если последовательность  $\{f(k)\}_0^\infty$  значений многочлена  $f$  при  $m \geq 0$  имеет производящую функцию  $\sum_{k=0}^\infty f(k)t^k = Q(t)(1-t)^{-m-1}$ ,  $\deg Q \leq m$ , причем  $\deg f \leq m$ , а  $\deg f = m$  тогда и только тогда, когда  $Q(1) \neq 0$ .

Обобщенные многочлены Эйлера  $A_{n,r}(t)$  подходят под это определение, так как из (13) имеем

$$A_{n,r}(t) = (1-t)^{rn+1} (t(1-t)^{1-r} d/dt) ((1-t)^{-r(n-1)-1} A_{n-1,r}(t))$$

и итерацией, аналогично доказательству теоремы (5), получаем представление

$$A_{n,r}(t) = (1-t)^{rn+1} H_r^n (1-t)^{-1}, H_r = \frac{t}{(1-t)^{r-1}} \frac{d}{dt}. \quad (14)$$

С помощью (14) несложно получить производящую функцию только при  $r=1$ , т.е. для обычных многочленов Эйлера  $A_n(t)$

$$\sum_{n=0}^{\infty} A_n(t) \frac{z^n}{n!} = \frac{1-t}{1-te^{z(1-t)}}.$$

Использование формулы (14) позволяет по индукции показать, что многочлены  $t^{-1}A_{n-1,r}(t)$  и  $t^{-1}A_{n,r}(t)$  ( $n \geq 2$ ) также образуют положительную пару аналогично результату теоремы 2.

В заключение отметим, что используемый параметр  $r$  может быть продолжен на множество целых или множество действительных чисел, но при этом теряется комбинаторный смысл рассматриваемых двухиндексных последовательностей  $V_{n,r,k}$ ,  $U_{n,r,k}$ ,  $S_{n,r,k}$ ,  $A_{n,r,k}$ .

#### Список литературы

1. **Риордан, Дж.** Введение в комбинаторный анализ / Дж. Риордан. – М. : Изд-во иностр. литер., 1963. – 288 с.
2. **Стенли, Р.** Перечислительная комбинаторика / Р. Стенли. – М. : Мир, 1990. – 440 с.
3. **Бондаренко, Л. Н.** Статистики на классах отображений / Л. Н. Бондаренко, М. Л. Шарапова // Дискретные модели в теории управляющих систем : VIII Междунар. конф. (Москва, 6–9 апреля 2009 г.). – М. : Издательский отдел факультета ВМиК МГУ им. М. В. Ломоносова; МАКС Пресс, 2009. – С. 33–39.
4. **Коганов, Л. М.** Псевдопорождаемые двухиндексные последовательности / Л. М. Коганов. – М. : Недра, 1989. – 86 с.
5. **Гульден, Я.** Перечислительная комбинаторика / Я. Гульден, Д. Джексон. – М. : Наука, 1990. – 504 с.
6. **Gessel, I.** Stirling polynomials / I. Gessel, R. P. Stanley // Journal of combinatorial theory. Series A. – 1978. – V 24. – № 1. – P. 24–33.
7. **Коганов, Л. М.** Универсальная биекция между перестановками Гесселя – Стенли и диаграммами связей соответствующих рангов / Л. М. Коганов // Успехи математических наук. – 1996. – Т. 51. – Вып. 2. – С. 165–166.
8. **Бондаренко, Л. Н.** Два типа  $r$ -перестановок и  $r$ -многочлены Эйлера / Л. Н. Бондаренко, М. Л. Шарапова // Дискретная математика и ее приложения : материалы X Междунар. семинара (Москва, МГУ, 1–6 февраля 2010 г.). – М. : Изд-во механико-математического факультета МГУ, 2010. – С. 217–220.
9. **Эндрюс, Г.** Теория разбиений / Г. Эндрюс. – М. : Наука, 1982. – 256 с.
10. **Грэхем, Р.** Конкретная математика. Основание информатики / Р. Грэхем, Д. Кнут, О. Паташник. – М. : Мир, 1998.
11. **Фоата, Д.** Распределения типа Эйлера и Макмагона на группе перестановок / Д. Фоата // Проблемы комбинаторного анализа : сб. статей. – М. : Мир, 1980. – С. 120–141.

---

**Бондаренко Леонид Николаевич**

кандидат технических наук, доцент,  
кафедра дискретной математики,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: dm@pnzgu.ru

**Bondarenko Leonid Nikolaevich**

Candidate of engineering sciences,  
associate professor, sub-department  
of discrete mathematics,  
Penza State University

**Шарапова Марина Леонидовна**

ассистент, кафедра общей топологии  
и геометрии, Московский  
государственный университет  
им. М. В. Ломоносова

E-mail: dm@pnzgu.ru

**Sharapova Marina Leonidovna**

Assistant, sub-department of general  
topology and geometry, Moscow State  
University named after M. V. Lomonosov

---

УДК 519.1

**Бондаренко, Л. Н.**

**Параметрические комбинаторные задачи и методы их исследования** / Л. Н. Бондаренко, М. Л. Шарапова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 50–63.

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПИРОЛИЗА ЭТАНА ЯВНЫМ МЕТОДОМ ТРЕТЬЕГО ПОРЯДКА ТОЧНОСТИ<sup>1</sup>**

*Аннотация.* Получены коэффициенты явного трехстадийного метода типа Рунге – Кутты. Построены неравенства для контроля точности вычислений и устойчивости численной схемы. Результаты моделирования пиролиза этана демонстрируют повышение эффективности за счет дополнительного контроля устойчивости.

*Ключевые слова:* жесткая задача, явный метод, контроль точности и устойчивости, пиролиз этана.

*Abstract.* Coefficients of explicit three-stage Runge – Kutta method have been obtained. The inequalities for exactness of calculations control and stability control of numerical scheme have been developed. Result numerical modeling of ethane pyrolysis demonstrate an efficiency increase with an additional stability control.

*Keywords:* stiff problem, explicit method, control accuracy and stability, pyrolysis of ethane.

### **Введение**

Во многих приложениях возникает необходимость решения задачи Коши для жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Обычно для численного решения таких задач применяют алгоритмы на основе неявных или полуявных численных формул вследствие их хороших свойств устойчивости. В данных методах используется декомпозиция матрицы Якоби с выбором главного элемента по строке или столбцу, а иногда и по всей матрице. При большой размерности исходной системы это отдельная трудоемкая задача. Если элементы матрицы Якоби носят нерегулярный характер, то получение данной матрицы и составление подпрограммы ее нахождения требуют от вычислителя больших затрат времени. Это характерно, например, для дифференциальных уравнений химической кинетики. При численном определении данной матрицы возникает проблема с выбором шага численного дифференцирования. В такой ситуации предпочтительнее применять алгоритмы на основе явных численных формул, если жесткость задачи позволяет за разумное время получить приближение к решению [1].

Современные алгоритмы на основе явных методов в большинстве своем не приспособлены для решения жестких задач по следующей причине. Обычно алгоритм управления шагом интегрирования строится на контроле точности численной схемы. Это естественно – основным критерием является точность нахождения решения. Однако при применении таких алгоритмов для решения жестких задач этот подход приводит к потере эффективности и надежности, потому что на участке установления вследствие противоречивости требований точности и устойчивости шаг интегрирования раскачивается. В лучшем случае это приводит к большому количеству повторных вычислений решения, а шаг выбирается значительно меньше допустимого. Этого

---

<sup>1</sup> Работа поддержана грантами РФФИ № 08–01–00621 и Президента НШ–3431.2008.9

можно избежать, если наряду с точностью контролировать устойчивость численной схемы.

В настоящее время можно выделить два подхода к контролю устойчивости [2–3]. Первый способ связан с оценкой максимального собственного числа матрицы Якоби  $f_y$  через ее норму с последующим контролем (наряду с контролем точности) неравенства  $h\|f_y\| \leq D$  [2], где  $h$  есть шаг интегрирования, а положительная постоянная  $D$  зависит от размера области устойчивости метода. Ясно, что для явных методов, в которых матрица Якоби  $f_y$  не участвует в вычислительном процессе, это приводит дополнительно к ее нахождению и, следовательно, к значительному увеличению вычислительных затрат.

Второй подход основан на оценке максимального собственного числа  $\lambda_{\max}$  матрицы Якоби степенным методом через приращения правой части системы дифференциальных уравнений с последующим контролем неравенства  $h|\lambda_{\max}| \leq D$  [3]. Во всех рассмотренных ситуациях такая оценка фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат [1, 3].

В данной работе построен алгоритм интегрирования переменного шага на основе трехстадийной схемы типа Рунге – Кутты третьего порядка с контролем точности вычислений и устойчивости численной схемы. На примере моделирования пиролиза этана продемонстрировано повышение эффективности расчетов за счет дополнительного контроля устойчивости.

### 1. Численная схема

Для численного решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$y' = f(y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k, \quad (1)$$

рассмотрим явный трехстадийный метод типа Рунге – Кутты вида

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(y_n), \quad k_2 = hf(y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $y$  и  $f$  – вещественные  $N$ -мерные вектор-функции;  $t$  – независимая переменная;  $h$  – шаг интегрирования;  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  – стадии метода;  $p_1$ ,  $p_2$ ,  $p_3$ ,  $\beta_{21}$ ,  $\beta_{31}$  и  $\beta_{32}$  – числовые коэффициенты, определяющие свойства точности и устойчивости (2). В случае неавтономной задачи

$$y' = f(t, y), \quad y(t_0) = y_0, \quad t_0 \leq t \leq t_k,$$

схема (2) записывается в виде

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3, \\ k_1 &= hf(t_n, y_n), \\ k_2 &= hf(t_n + \beta_{21} h, y_n + \beta_{21} k_1), \\ k_3 &= hf(t_n + [\beta_{31} + \beta_{32}] h, y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2). \end{aligned}$$

Ниже для сокращения выкладок будем рассматривать (1). Однако построенные далее методы можно применять для решения неавтономных задач.

Получим соотношения на коэффициенты метода (2) третьего порядка точности. Для этого разложим стадии  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  в ряды Тейлора по степеням  $h$  до членов с  $h^4$  включительно и подставим в первую формулу (2). В результате получим

$$\begin{aligned} y_{n+1} = & y_n + (p_1 + p_2 + p_3)hf_n + [\beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{31})p_3]h^2 f'_n f_n + \\ & + h^3 \left[ \beta_{21}\beta_{32}p_3 f_n^2 f_n + \frac{1}{2}(\beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3) f_n'' f_n^2 \right] + \\ & + h^4 \left[ \frac{1}{2}\beta_{21}^2 \beta_{32} p_3 f_n' f_n'' f_n^2 + \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32} p_3 f_n'' f_n' f_n^2 + \right. \\ & \left. + \frac{1}{6}(\beta_{21}^3 \delta_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3) f_n''' f_n^3 \right] + O(h^5), \end{aligned} \quad (3)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на приближенном решении  $y_n$ , т.е.  $f_n = f(y_n)$ ,  $f'_n = \partial f(y_n)/\partial y$ ,  $f''_n = \partial^2 f(y_n)/\partial y^2$  и  $f'''_n = \partial^3 f(y_n)/\partial y^3$ . Точное решение  $y(t_{n+1})$  в окрестности точки  $t_n$  имеет вид

$$\begin{aligned} y(t_{n+1}) = & y(t_n) + hf + 0,5h^2 ff' + \frac{1}{6}h^3 [f'^2 f + f f''^2] + \\ & + \frac{1}{24}h^4 [f'^3 f + f f'' f'^2 + 3 f f'' f'^2 + f''' f^3] + O(h^5), \end{aligned} \quad (4)$$

где элементарные дифференциалы вычислены на точном решении  $y(t_n)$ .

Сравнивая полученные ряды для приближенного (3) и точного (4) решений до членов с  $h^3$  включительно при условии  $y_n = y(t_n)$ , запишем условия третьего порядка точности схемы (2):

$$\begin{aligned} p_1 + p_2 + p_3 &= 1, \\ \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 &= 0,5, \\ \beta_{21}^2 p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2 p_3 &= 1/3, \\ \beta_{21}\beta_{32}p_3 &= 1/6. \end{aligned} \quad (5)$$

В предположении  $y_n = y(t_n)$  локальную ошибку  $\delta_{n+1}$  схемы (2) можно вычислить по формуле  $\delta_{n+1} = y(t_{n+1}) - y_{n+1}$ . Учитывая представления  $y_{n+1}$  и  $y(t_{n+1})$  в виде рядов Тейлора (3) и (4), запишем

$$\begin{aligned} \delta_{n+1} = & h^4 \left\{ \frac{1}{24} f'^3 f + \left( \frac{1}{24} - \frac{1}{2} \beta_{21}^2 \beta_{32} p_3 \right) f f'' f'^2 + \left[ \frac{1}{8} - \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32} p_3 \right] \times \right. \\ & \left. \times f f'' f'^2 + \left[ \frac{1}{24} - \frac{1}{6} \beta_{21}^3 p_2 - \frac{1}{6} (\beta_{31} + \beta_{32})^3 p_3 \right] f''' f^3 \right\} + O(h^5). \end{aligned} \quad (6)$$

Далее получим коэффициенты численной схемы (2) третьего порядка точности.

## 2. Исследование условий порядка

В нелинейной системе алгебраических уравнений (5) два свободных коэффициента. Исследуем три варианта.

**Вариант 1.** Положим  $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$  и  $\beta_{31} = \beta_{32}$ . Это означает, что приращения  $k_2$  и  $k_3$  будут вычислены в одной и той же точке  $t_n + \beta_{21}h$ , причем вклад  $k_1$  и  $k_2$  при определении  $k_3$  учитывается одинаково. Тогда нелинейную систему (5) можно переписать в виде

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \beta_{21}(p_2 + p_3) = \frac{1}{2};$$

$$3) \beta_{21}^2(p_2 + p_3) = \frac{1}{3};$$

$$4) \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6}.$$

Из второго и третьего уравнений данной системы имеем  $\beta_{21} = 2/3$ . Из соотношений  $\beta_{21} = \beta_{31} + \beta_{32}$  и  $\beta_{31} = \beta_{32}$  запишем  $\beta_{31} = \beta_{32} = 1/3$ . Из четвертого уравнения системы получим  $p_3 = 3/4$ . Из равенства  $p_2 + p_3 = 3/4$  имеем  $p_2 = 0$ . Наконец, из первого соотношения системы получим  $p_1 = 1/4$ . В результате коэффициенты схемы (2) определяются однозначно и имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{2}{3}, \beta_{31} = \beta_{32} = \frac{1}{3}, p_1 = \frac{1}{4}, p_2 = 0, p_3 = \frac{3}{4}. \quad (7)$$

При данных соотношениях локальную ошибку  $\delta_{n+1}$  схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{216}h^4 \left[ 9f'^3f + f''f^3 - 3ff'f'^2 + 3f''f'f^2 \right] + O(h^5).$$

**Вариант 2.** Минимизируем локальную ошибку (6). Для этого, учитывая вид (6), вместо (5) рассмотрим следующую расширенную нелинейную систему алгебраических уравнений:

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \beta_{21}p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})p_3 = \frac{1}{2};$$

$$3) \beta_{21}^2p_2 + (\beta_{31} + \beta_{32})^2p_3 = \frac{1}{3};$$

$$4) \beta_{21}\beta_{32}p_3 = \frac{1}{6};$$

$$5) \beta_{21}^2\beta_{32}p_3 = \frac{1}{12};$$

$$6) \beta_{21}(\beta_{31} + \beta_{32})\beta_{32}p_3 = \frac{1}{8}.$$

Исследуем совместность данной системы. При  $3\beta_{21}/2 = \beta_{31} + \beta_{32}$  два последних уравнения совпадают. Из четвертого и пятого соотношений имеем  $\beta_{21} = 1/2$ . Из второго и третьего равенств получим  $p_2 = 1/3$  и  $p_3 = 4/9$ . Из первого уравнения запишем  $p_1 = 2/9$ , а из четвертого имеем  $\beta_{32} = 3/4$ . Наконец, из соотношения  $\beta_{31} + \beta_{32} = 3/4$  запишем  $\beta_{31} = 0$ . В результате коэффициенты метода (2) с минимальной локальной ошибкой можно записать в виде

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \beta_{31} = 0, \beta_{32} = \frac{3}{4}, p_1 = \frac{2}{9}, p_2 = \frac{1}{3}, p_3 = \frac{4}{9}. \quad (8)$$

При данных соотношениях локальную ошибку  $\delta_{n+1}$  схемы (2) можно представить следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{288} h^4 [12f''^3 f - f''f^3] + O(h^5).$$

При использовании (2) с наборами коэффициентов (7) или (8) ни одна стадия не вычисляется в точке  $t_{n+1}$ . При быстром изменении решения это может приводить к понижению эффективности расчетов.

**Вариант 3.** Положим  $\beta_{21} = 1/2$  и  $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$ . Тогда на каждом шаге приращения  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  вычисляются соответственно в точках  $t_n$ ,  $t_n + 0,5h$  и  $t_n + h$ . В этом случае условия третьего порядка записываются в виде

$$1) p_1 + p_2 + p_3 = 1;$$

$$2) \frac{1}{2} p_2 + p_3 = \frac{1}{2};$$

$$3) \frac{1}{4} p_2 + p_3 = \frac{1}{3};$$

$$4) \beta_{32} p_3 = \frac{1}{3}.$$

Из второго и третьего равенств данной системы запишем  $p_2 = 2/3$  и  $p_3 = 1/6$ . Из первого и последнего уравнений имеем  $p_1 = 1/6$  и  $\beta_{32} = 2$ . Из равенства  $\beta_{31} + \beta_{32} = 1$  следует  $\beta_{31} = -1$ . В результате коэффициенты метода (2) имеют вид

$$\beta_{21} = \frac{1}{2}, \beta_{31} = -1, \beta_{32} = 2, p_1 = \frac{1}{6}, p_2 = \frac{2}{3}, p_3 = \frac{1}{6}. \quad (9)$$

При данных соотношениях локальную ошибку  $\delta_{n+1}$  схемы (2) можно записать следующим образом:

$$\delta_{n+1} = \frac{1}{72} h^4 [3f''^3 f - 3f''f^2 - f''f^3] + O(h^5).$$

### 3. Контроль точности вычислений

Построим неравенство для контроля точности вычислений метода третьего порядка. Для этого рассмотрим вспомогательную схему

$$y_{n+1,1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2,$$

где  $k_1$  и  $k_2$  определены в (2). Потребуем, чтобы данный метод имел второй порядок точности. Разложение приближенного решения  $y_{n+1,1}$  в виде ряда Тейлора по степеням  $h$  имеет вид

$$y_{n+1,1} = y_n + (r_1 + r_2)hf'_n + \beta_{21}r_2h^2f'_nf'_n + O(h^3).$$

Сравнивая ряды Тейлора для точного  $y(t_{n+1})$  и приближенного  $y_{n+1,1}$  решений, видим, что требование второго порядка точности будет выполнено, если

$$r_1 + r_2 = 1, \beta_{21}r_2 = 0,5.$$

Отсюда получим

$$r_2 = 0,5/\beta_{21}, r_1 = 1 - r_2,$$

где значение  $\beta_{21}$  определено в (7), (8) или (9). Теперь с помощью идеи вложенных методов оценку аналога глобальной ошибки  $\varepsilon_{n,3}$  метода третьего порядка точности можно вычислить по формуле [1]

$$\varepsilon_{n,3} = y_{n+1} - y_{n+1,1} = (p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3.$$

Тогда неравенство для контроля точности вычислений имеет вид

$$\|(p_1 - r_1)k_1 + (p_2 - r_2)k_2 + p_3k_3\| \leq \varepsilon,$$

где  $\|\bullet\|$  – некоторая норма в  $R^N$ ;  $\varepsilon$  – требуемая точность интегрирования. В конкретных расчетах применялся метод (2) с коэффициентами (9) как более надежный. Тогда неравенство для контроля точности имеет вид

$$\|k_1 - 2k_2 + k_3\| \leq 6\varepsilon. \quad (10)$$

### 3. Контроль устойчивости численной схемы

Теперь построим неравенство для контроля устойчивости численной формулы (2) предложенным в [1] способом. Запишем стадии  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  применительно к задаче  $y' = Ay$ , где  $A$  – матрица с постоянными коэффициентами. В результате получим

$$k_1 = Xy_n, \quad k_2 = (X + \beta_{21}X^2)y_n,$$

$$k_3 = \left[ X + (\beta_{31} + \beta_{32})X^2 + \beta_{21}\beta_{32}X^3 \right] y_n,$$

где  $X = hA$ .

Найдем коэффициенты  $d_1$ ,  $d_2$  и  $d_3$  из условия

$$d_1k_1 + d_2k_2 + d_3k_3 = X^3y_n.$$

Данное требование будет выполнено, если

$$d_1 = (\beta_{31} + \beta_{32} - \beta_{21})/d, \quad d_2 = -(\beta_{31} + \beta_{32})/d, \quad d_3 = \beta_{21}/d,$$

где  $d = \beta_{21}^2\beta_{32}$ . Нетрудно видеть также, что

$$\beta_{21}^{-1}(k_2 - k_1) = X^2y_n.$$

Тогда согласно [1] оценку максимального собственного числа  $\nu_{n,3} = h|\lambda_{\max}|$  матрицы Якоби системы (1) можно вычислить по формуле

$$\nu_{n,3} = \beta_{21} \max_{1 \leq i \leq N} \left( |d_1 k_1^i + d_2 k_2^i + d_3 k_3^i| / |k_2^i - k_1^i| \right).$$

Интервал устойчивости численной схемы (2) приблизительно равен 2,5. Поэтому для ее контроля устойчивости можно применять неравенство  $\nu_{n,3} \leq 2,5$ . Полученная оценка является грубой, потому что:

- 1) вовсе не обязательно максимальное собственное число сильно отделено от остальных;
- 2) в степенном методе применяется мало итераций;
- 3) дополнительные искажения вносит нелинейность задачи (1).

Поэтому здесь контроль устойчивости используется как ограничитель на размер шага интегрирования. В результате прогнозируемый шаг  $h_{n+1}$  будем вычислять следующим образом.

Новый шаг  $h^{ac}$  по точности определим по формуле  $h^{ac} = q_1 h_n$ , где  $h_n$  есть последний успешный шаг интегрирования, а  $q_1$ , учитывая соотношение  $\varepsilon_{n,3} = O(h_n^3)$ , задается уравнением  $q_1^3 \|\varepsilon_{n,3}\| = \varepsilon$ . Шаг  $h^{st}$  по устойчивости зададим формулой  $h^{st} = q_2 h_n$ , где  $q_2$ , учитывая равенство  $\nu_{n,3} = O(h_n)$ , определяется из уравнения  $q_2 \nu_{n,3} = 2,5$ . В результате шаг  $h_{n+1}$  вычисляется по формуле

$$h_{n+1} = \max \left[ h_n, \min(h^{ac}, h^{st}) \right].$$

Если шаг по устойчивости меньше последнего успешного, то он уменьшен не будет, потому что причиной этого может быть грубость оценки максимального собственного числа. Однако шаг не будет и увеличен, потому что не исключена возможность неустойчивости численной схемы. Если шаг по устойчивости должен быть уменьшен, то в качестве следующего шага будет применяться последний успешный шаг  $h_n$ . В результате для выбора шага и предлагается данная формула. Она позволяет стабилизировать поведение шага на участке установления решения, где определяющую роль играет устойчивость. Собственно говоря, именно наличие этого участка существенно ограничивает возможности применения явных методов для решения жестких задач.

#### 4. Численное моделирование пиролиз этана

Расчеты проводились на Intel(R) Core 2 Quad CPU с двойной точностью. В конкретных расчетах левая часть неравенства для контроля точности (10) вычислялась по формуле

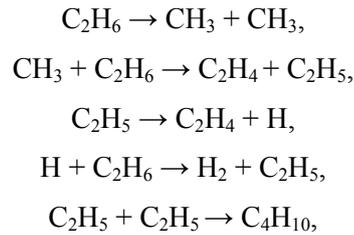
$$\|k_1 - 2k_2 + k_3\| = \max_{1 \leq i \leq N} \left[ |k_1^i - 2k_2^i + k_3^i| / (|y_n^i| + r) \right],$$

где  $i$  – номер компоненты;  $r$  – положительный параметр.

Если по  $i$ -й компоненте решения выполняется неравенство  $|y_n^i| < r$ , то контролируется абсолютная ошибка  $r\varepsilon$ , в противном случае – относительная ошибка  $\varepsilon$ . В расчетах параметр  $r$  выбирался таким образом, чтобы по всем компонентам решения фактическая точность была не хуже задаваемой.

Пиролиз этана в отсутствие кислорода описывается небольшой последовательностью стадий. Механизм пиролиза этана неоднократно обсу-

ждался в литературе. Здесь принята схема реакции, предложенная и исследованная в [4]



где константы скоростей стадий имеют вид

$$k_1 = 1,34 \cdot 10^{-5}, k_2 = 3,73 \cdot 10^2, k_3 = 3,69 \cdot 10^3, k_4 = 3,66 \cdot 10^5, k_5 = 1,62 \cdot 10^7.$$

Обозначим концентрации реагентов следующим образом:

$$\begin{aligned} c_1 &= [\text{C}_2\text{H}_6], c_2 = [\text{CH}_3], c_3 = [\text{CH}_4], c_4 = [\text{C}_2\text{H}_5], \\ c_5 &= [\text{C}_2\text{H}_4], c_6 = [\text{H}], c_7 = [\text{H}_2], c_8 = [\text{C}_4\text{H}_{10}]. \end{aligned}$$

Соответствующую систему дифференциальных уравнений можно получить с применением алгоритма, описанного в [5]. Данная система состоит из восьми уравнений и имеет вид

$$\begin{aligned} c_1' &= -k_1c_1 - k_2c_1c_2 - k_4c_1c_6, c_2' = 2k_1c_1 - k_2c_1c_2, c_3' = k_2c_1c_2, \\ c_4' &= k_2c_1c_2 - k_3c_4 + k_4c_1c_6 - 2k_5c_4^2, c_5' = k_3c_4, \\ c_6' &= k_3c_4 - k_4c_1c_6, c_7' = k_4c_1c_6, c_8' = k_5c_4^2. \end{aligned} \quad (11)$$

Начальная концентрация этана  $c_1 = [\text{C}_2\text{H}_6]$  равна 0,14, для остальных реагентов начальные концентрации равны нулю.

Расчеты осуществлялись с точностью  $\varepsilon = 10^{-4}$ , при которой наиболее эффективны методы третьего порядка. Эффективность алгоритмов интегрирования оценивалась по числу вычислений правой части  $if$  задачи (11) на интервале интегрирования. Численное решение осуществлялось на промежутке  $[0; 0,26]$  с начальным шагом  $h = 10^{-5}$ . Данная задача удовлетворяет «классическому» определению жесткости. В начале интервала интегрирования наблюдается переходный участок (сотые доли секунды), а затем происходит медленное установление.

Сравнение эффективности алгоритма интегрирования без контроля устойчивости (RK3) и с контролем устойчивости (RK3ST) проводилось известным методом Мерсона [6]. Для всех методов фактическая точность не хуже задаваемой точности. Алгоритму RK3 для нахождения решения потребовалось 19 790 вычислений правой части задачи (11), для алгоритма RK3ST  $if = 17\ 004$ , а для метода Мерсона  $if = 26\ 876$ . Таким образом, на умеренно жестких задачах построенный алгоритм с контролем точности и устойчивости примерно в полтора раза эффективнее метода Мерсона.

### Заключение

Из результатов расчетов можно сделать следующие выводы. Во-первых, построенный алгоритм интегрирования третьего порядка с контро-

лем точности вычислений и устойчивости численной схемы можно применять для решения достаточно жестких задач. Во-вторых, по вычислительным затратам алгоритм RK3ST эффективнее метода Мерсона примерно в 1,5 раза. Это является следствием контроля устойчивости численной схемы. Представляется, что при достаточно большой размерности задачи (11) метод RK3ST может конкурировать с неявными методами на задачах умеренной жесткости, потому что в нем не обращается матрица Якоби.

Использование неравенства для контроля устойчивости фактически не приводит к увеличению вычислительных затрат, потому что оценка максимального собственного числа матрицы Якоби системы (1) осуществляется через ранее вычисленные стадии и не приводит к росту числа вычислений функции  $f$ . Такая оценка получается грубой. Однако применение контроля устойчивости в качестве ограничителя на рост шага позволяет избежать негативных последствий грубости оценки.

#### **Список литературы**

1. **Новиков, Е. А.** Явные методы для жестких систем / Е. А. Новиков. – Новосибирск : Наука, 1997.
2. **Shampine, L. M.** Implementation of Rosenbrock methods / L. M. Shampine // ACM Transaction on Mathematical Software. – 1982. – V. 8. – № 5. – P. 93–113.
3. **Новиков, В. А.** Контроль устойчивости явных одношаговых методов интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений / В. А. Новиков, Е. А. Новиков // ДАН СССР. – 1984. – Т. 277. – № 5. – С. 1058–1062.
4. **Kulich, D. M.** Mathematical simulation of the oxygen ethane reaction / D. M. Kulich, J.E. Taylor // J. Chem. Kinet. – 1975. – V. 8. – P. 89–97.
5. **Новиков, Е. А.** Комплекс программ моделирования кинетики сложных реакций / Е. А. Новиков, Ю. А. Шитов, В. И. Бабушок, Д. В. Марьин // Прямые и обратные задачи в химической кинетике. – Новосибирск : Наука, 1993. – С. 22–38.
6. **Merson, R. H.** An operational methods for integration processes / R. H. Merson // Proc. of Symposium on Data Processing. Weapons Research Establishment. – Australia : Salisbury, – 1957. – P. 329–331.

---

**Новиков Евгений Александрович**

доктор физико-математических наук,  
профессор, главный научный сотрудник,  
Институт вычислительного  
моделирования СО РАН (Красноярск)

E-mail: novikov@icm.krasn.ru

**Novikov Evgeny Alexandrovich**

Doctor of Physical and Mathematical  
Sciences, chief researcher, Institute  
of computational modeling of the Russian  
Academy of Sciences (Krasnoyarsk)

---

УДК 519.622

**Новиков, Е. А.**

**Численное моделирование пиролиза этана явным методом третьего порядка точности** / Е. А. Новиков // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 64–72.

УДК 517.6

Е. Е. Гришина, Е. Д. Деревянчук, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов

**ЧИСЛЕННОЕ И АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ  
ДИФРАКЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ  
НА ДВУХ СЕКЦИЯХ С РАЗНОЙ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ  
ПРОНИЦАЕМОСТЬЮ, РАСПОЛОЖЕННЫХ  
В ПРЯМОУГОЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ**

*Аннотация.* Рассмотрена задача дифракции электромагнитного поля на диэлектрическом теле в форме параллелепипеда, расположенном в прямоугольном волноводе и состоящем из двух слоев с разной диэлектрической проницаемостью. Получено аналитическое решение уравнений Максвелла для случая заполнения двух секций волновода. Представлены результаты численных расчетов решения интегродифференциального уравнения методом коллокации.

*Ключевые слова:* электромагнитная задача дифракции, аналитическое решение задачи дифракции, метод коллокаций.

*Abstract.* Electromagnetic diffraction problem on dielectric body located in rectangular waveguide and consisted of two layers is considered. The analytical solving of Maxwell's equations in case of filling of two section of the waveguide is obtained. Numerical results for solution of integro-differential equation by collocation method are presented.

*Keywords:* electromagnetic diffraction problem, analytical solution of diffraction problem, collocation method.

### Введение

В работе [1] была рассмотрена задача расчета электромагнитной дифракции на диэлектрическом теле, расположенном в прямоугольном волноводе. В статье [2] в качестве тела был взят однородный диэлектрический параллелепипед и было получено аналитическое и численное решение уравнений Максвелла для данного частного случая. В настоящей работе в качестве тела  $Q$  рассматривается параллелепипед, состоящий из двух слоев с разной диэлектрической проницаемостью. Полученные результаты могут быть применены в различных практических приложениях.

### Постановка задачи, численный метод

Пусть в декартовой системе координат  $P = \{x : 0 < x_1 < a, 0 < x_2 < b, -\infty < x_3 < \infty\}$  – волновод с идеально проводящей поверхностью  $\partial P$ . Пусть  $Q$  ( $Q \subset P$  – область) – объемное тело, расположенное в волноводе, с постоянной магнитной проницаемостью  $\mu_0$  и положительной  $3 \times 3$ -матрицей-функцией (тензором) диэлектрической проницаемости  $\bar{\epsilon}(x)$ . Компоненты  $\bar{\epsilon}(x)$  являются ограниченными функциями в области  $\bar{Q}$ ,  $\bar{\epsilon} \in L_\infty(Q)$ , а также  $\bar{\epsilon}^{-1} \in L_\infty(Q)$ .

Рассмотрим задачу о нахождении электромагнитного поля  $\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_{2,\text{loc}}(P)$ , возбуждаемого в волноводе сторонним полем с временной зависимостью вида  $e^{-i\omega t}$ . Электрический ток  $\mathbf{j}^0 \in L_{2,\text{loc}}(P)$  – источник сто-

ронного поля. Стандартные дифференциальные операторы  $\text{grad}$ ,  $\text{div}$ ,  $\text{rot}$  в области  $P \subset R^3$  понимаются в смысле обобщенных функций.

Будем искать обобщенные решения уравнений Максвелла:

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= -i\omega \hat{\epsilon} \mathbf{E} + \mathbf{J}_E^0; \\ \text{rot } \mathbf{E} &= i\omega \mu_0 \mathbf{H}. \end{aligned} \quad (1)$$

Учитывая условия на бесконечности и краевые условия, описанные в [3], уравнения Максвелла можно свести к интегродифференциальному уравнению

$$\begin{aligned} E(x) &= E_0(x) + k_0^2 \int_Q \hat{G}_E(r) \left( \frac{\hat{\epsilon}(y)}{\epsilon_0} - I \right) E(y) dy + \\ &+ \text{grad div} \int_Q \hat{G}_E(r) \left( \frac{\hat{\epsilon}(y)}{\epsilon_0} - I \right) E(y) dy, \quad x \in Q. \end{aligned} \quad (2)$$

Компоненты диагонального тензора Грина  $\hat{G}_E$  имеют вид [4, 5]

$$G_E^1 = \frac{2}{ab} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}(1+\delta_{0n})} \cos \frac{\pi n}{a} x_1 \sin \frac{\pi m}{b} x_2 \cos \frac{\pi n}{a} y_1 \sin \frac{\pi m}{b} y_2; \quad (3)$$

$$G_E^2 = \frac{2}{ab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}(1+\delta_{0m})} \sin \frac{\pi n}{a} x_1 \cos \frac{\pi m}{b} x_2 \sin \frac{\pi n}{a} y_1 \cos \frac{\pi m}{b} y_2; \quad (4)$$

$$G_E^3 = \frac{2}{ab} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\gamma_{nm}|x_3-y_3|}}{\gamma_{nm}} \sin \frac{\pi n}{a} x_1 \sin \frac{\pi m}{b} x_2 \sin \frac{\pi n}{a} y_1 \sin \frac{\pi m}{b} y_2. \quad (5)$$

В этих выражениях  $\gamma_{nm} = \sqrt{\left(\frac{\pi n}{a}\right)^2 + \left(\frac{\pi m}{b}\right)^2 - k_0^2}$ , при этом ветвь квадратного корня выбирается так, чтобы  $\text{Im } \gamma_{nm} \geq 0$ .

Будем предполагать, что тензор диэлектрической проницаемости тела  $\hat{\epsilon}(x)$  удовлетворяет условиям  $\left(\frac{\hat{\epsilon}(x)}{\epsilon_0} - \hat{I}\right)$ , обратим в  $\bar{Q}$  и  $\left(\frac{\hat{\epsilon}(x)}{\epsilon_0} - \hat{I}\right)^{-1} \in L_{\infty}(Q)$ , где  $\hat{I}$  – единичный тензор. Введем обозначения:

$$\xi = \left(\frac{\hat{\epsilon}(x)}{\epsilon_0} - \hat{I}\right)^{-1}, \quad \mathbf{J} := \left(\frac{\hat{\epsilon}(x)}{\epsilon_0} - \hat{I}\right) \mathbf{E}.$$

Описанное выше позволяет перейти к следующему уравнению:

$$A\mathbf{J} = \xi \mathbf{J}(x) - k_0^2 \int_Q \hat{G}_E(x, y) \mathbf{J}(y) dy - \text{grad div} \int_Q \hat{G}_E(x, y) \mathbf{J}(y) dy = \mathbf{E}^0(x). \quad (6)$$

Уравнение (6) может быть решено различными численными методами. Например, методом Галеркина или методом коллокации. В данной работе был выбран метод коллокации, так как использование метода Галеркина влечет за собой более громоздкие формулы и выкладки.

Известные методы не позволяют рассчитать электромагнитное поле для волновода, состоящего из нескольких частей с различной диэлектрической проницаемостью. В настоящей статье будет получено аналитическое решение уравнений (1) для тела  $Q$ , являющегося секцией волновода и состоящего из двух частей с различной диэлектрической проницаемостью. Также будут представлены результаты численных расчетов для метода коллокации.

**Аналитическое решение в частном случае для задачи дифракции**

Пусть тело  $Q$  представляет собой секцию волновода:  $Q = \{x : 0 < x_1 < a, 0 < x_2 < b, 0 < x_3 < c\}$  (рис 1). Тело представляет собой перегородку волновода длиной  $l_2$  по оси  $x_3$ . В области  $0 < x_3 < l_1$  тело имеет постоянную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_1$ , а в области  $l_1 < x_3 < l_2$  тело имеет постоянную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_2$ .

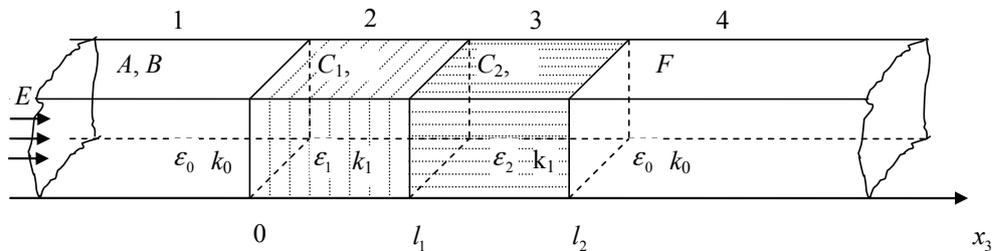


Рис. 1

Будем предполагать, что размеры волновода удовлетворяют условию

$$\frac{\pi}{a} < k_0 < \frac{\pi}{b},$$

при котором распространяется только одна волна в волноводе [8].

Рассмотрим поведение поля внутри тела. Предположим, что падающее поле имеет вид

$$E = A \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) e^{-i\gamma_1 x_3} \mathbf{e}_2. \tag{7}$$

Здесь и далее в статье под коэффициентами  $A$  и  $F$  будем подразумевать следующие выражения:  $A = A^{(+)} i\omega\mu_0 \frac{\pi}{a}$  и  $F = Q_1^{(+)} i\omega\mu_0 \frac{\pi}{a}$ , а

$$\gamma_0 = \gamma_1^{(2)} = \sqrt{k_0^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}, \quad \gamma_1 = \sqrt{k_1^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}, \quad \gamma_2 = \sqrt{k_2^2 - \frac{\pi^2}{a^2}}.$$

В области 2 ( $x_3 \in (0, l_1)$ ) поле имеет вид

$$\mathbf{E} = \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \left( C_1 e^{-i\gamma_1 x_3} + D_1 e^{i\gamma_1 x_3} \right) \mathbf{e}_2. \tag{8}$$

В области 3  $x_3 \in (l_1, l_2)$  поле имеет представление

$$\mathbf{E} = \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \left( C_2 e^{-i\gamma_2 x_3} + D_2 e^{i\gamma_2 x_3} \right) \mathbf{e}_2. \quad (9)$$

В области 4  $x_3 \in (l_2, \infty)$  поле имеет представление

$$\mathbf{E} = \sin\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \left( F e^{-i\gamma_0 x_3} \right) \mathbf{e}_2. \quad (10)$$

На границе областей 1 и 2, областей 2 и 3, а также на границе областей 3 и 4 должны выполняться условия сопряжения [2]:

$$\begin{aligned} [E_2]_{x_3=0} &= [E_2]_{x_3=c} = 0; \\ [H_1]_{x_3=0} &= [H_1]_{x_3=c} = 0 \Leftrightarrow \left[ \frac{\partial E_2}{\partial x_3} \right]_{x_3=0} = \left[ \frac{\partial E_2}{\partial x_3} \right]_{x_3=c} = 0, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{E} = E_2 \mathbf{e}_2$ .

Для коэффициентов  $A, B, C_1, D_1, C_2, D_2, F$  получаем уравнения:

– при  $x_3 = 0$ :

$$\begin{cases} A + B = C_1 + D_1, \\ \gamma_0 (B - A) = \gamma_1 (D_1 - C_1); \end{cases} \quad (11)$$

– при  $x_3 = l_1$ :

$$\begin{cases} C_1 e^{-i\gamma_1 l_1} + D_1 e^{i\gamma_1 l_1} = C_2 e^{-i\gamma_2 l_1} + D_2 e^{i\gamma_2 l_1}, \\ \gamma_1 (-C_1 e^{-i\gamma_1 l_1} + D_1 e^{i\gamma_1 l_1}) = \gamma_2 (-C_2 e^{-i\gamma_2 l_1} + D_2 e^{i\gamma_2 l_1}); \end{cases} \quad (12)$$

– при  $x_3 = l_2$ :

$$\begin{cases} C_2 e^{-i\gamma_2 l_2} + D_2 e^{i\gamma_2 l_2} = F e^{-i\gamma_0 l_2}, \\ \gamma_2 (-C_2 e^{-i\gamma_2 l_2} + D_2 e^{i\gamma_2 l_2}) = -\gamma_0 F e^{-i\gamma_0 l_2}. \end{cases} \quad (13)$$

Коэффициент  $A$  известен, для коэффициентов  $B, C_1, D_1, C_2, D_2, F$  получаем следующие формулы:

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{2A\gamma_0}{e^{-2i\gamma_1 l_1} (\gamma_0 - \gamma_1) \frac{2\gamma_2 - r \cdot s_1}{r \cdot s_2 - 2\gamma_2} + \gamma_0 + \gamma_1}, \quad D_1 = \frac{2A\gamma_0}{\gamma_0 - \gamma_1} - C_1 \cdot \frac{\gamma_0 + \gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1}, \\ D_2 &= \frac{1}{2\gamma_2} e^{-i\gamma_2 l_1} \left[ C \left( s_1 \cdot e^{-i\gamma_1 l_1} - \frac{\gamma_0 + \gamma_1}{\gamma_0 - \gamma_1} \cdot s_2 \cdot e^{i\gamma_1 l_1} \right) + \frac{2A\gamma_0}{\gamma_0 - \gamma_1} e^{i\gamma_1 l_1} \cdot s_2 \right], \\ C_2 &= \frac{\gamma_0 + \gamma_2}{\gamma_2 - \gamma_0} \cdot e^{2i\gamma_2 l_2} D_2, \quad B = \frac{1}{2\gamma_0} \cdot (C_1 (\gamma_0 - \gamma_1) + D_1 (\gamma_0 + \gamma_1)), \end{aligned}$$

$$F = e^{i\gamma_0 l_2} \left( C_2 e^{-i\gamma_2 l_2} + D_2 e^{i\gamma_2 l_2} \right),$$

где  $r = e^{2i\gamma_2 l_2 - 2i\gamma_2 l_1} \left( \frac{\gamma_0 + \gamma_2}{\gamma_2 - \gamma_0} \right) + 1$ ,  $s_1 = \gamma_2 - \gamma_1$ ,  $s_2 = \gamma_2 + \gamma_1$ .

### Численное решение

Рассмотрим вопрос о построении схемы метода коллокации для решения объемного сингулярного интегродифференциального уравнения, к которому сводится краевая задача дифракции электромагнитной волны на диэлектрическом теле, расположенном в прямоугольном волноводе [4–8].

Сформулируем метод коллокации для интегродифференциального уравнения (2). Этот подход оказывается эффективным в силу более удобного представления интегралов. Рассмотрим подробнее уравнение (6):

$$A\mathbf{J} = \xi\mathbf{J}(x) - k_0^2 \int_Q \widehat{G}_E(x, y)\mathbf{J}(y)dy - \text{grad div} \int_Q \widehat{G}_E(x, y)\mathbf{J}(y)dy = \mathbf{E}^0(x).$$

Здесь  $\vec{E}$  – неизвестное электрическое поле;  $\mathbf{E}^0$  – известное внешнее электрическое поле (распространяющаяся волна в волноводе);  $k_0$  – волновое число вакуума,  $k_0^2 = \omega^2 \varepsilon_0 \mu_0$ ;  $\omega$  – круговая частота.

Представим это уравнение в виде системы трех скалярных уравнений:

$$\sum_{i=1}^3 \xi_{li} J^i(x) - k_0^2 \int_Q G(x, y) J^l(y) dy - \frac{\partial}{\partial x_l} \text{div}_x \int_Q G(x, y) \vec{J}(y) dy = E^{0l}(x), \quad (14)$$

$l = 1, 2, 3$ .

Будем искать компоненты приближенного решения  $\vec{J}$  в виде

$$\vec{J}^1 = \sum_{k=1}^N \alpha_k^1 f_k^1(x), \quad \vec{J}^2 = \sum_{k=1}^N \alpha_k^2 f_k^2(x), \quad \vec{J}^3 = \sum_{k=1}^N \alpha_k^3 f_k^3(x),$$

где  $f_k^i$  – базисные функции.

Ниже проводится построение функций  $f_k^i$ . Будем считать, что  $Q$  – параллелепипед:  $Q = \{x : a_1 < x_1 < a_2, b_1 < x_2 < b_2, c_1 < x_3 < c_2\}$ . Разобьем тело  $Q$  на элементарные параллелепипеды:

$$P_{klm} = \{x : x_{1,k} < x_1 < x_{1,k+1}, x_{2,l} < x_2 < x_{2,l+1}, x_{3,m} < x_3 < x_{3,m+1}\};$$

$$x_{1,k} = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{n} k, \quad x_{2,l} = b_1 + \frac{b_2 - b_1}{n} l, \quad x_{3,m} = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{n} m,$$

где  $k, l, m = 0, \dots, n-1$ .

Будем считать, что шаг по каждой координате постоянен:  $h^i := |x_{i,k} - x_{i,k-1}|$ . Наряду с обычной нумерацией нам удобно будет ввести трехиндексную нумерацию базисных функций. Определим  $f_{klm}^i$  ( $i = 1, 2, 3$ ):

$$f_{klm}^i = \begin{cases} 1, & x \in \bar{\Pi}_{klm}, \\ 0, & x \notin \bar{\Pi}_{klm}. \end{cases}$$

Построенное множество базисных функций удовлетворяет необходимому условию аппроксимации в  $L_2^3(Q) = L_2(Q) \times L_2(Q) \times L_2(Q)$ .

Расширенную матрицу для нахождения неизвестных коэффициентов  $\alpha_k^1, \alpha_k^2, \alpha_k^3$  удобно представить в блочной форме:

$$\left( \begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & A_{13} & B_1 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & B_2 \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & B_3 \end{array} \right).$$

Элементы столбцов  $B_k$  и матриц  $A_{kl}$  определяются из соотношений:

$$B_k^i = E_0^k(x_i); \quad (15)$$

$$A_{kl}^{ij} = \xi_{kl} f_i^l(x_j) - \delta_{kl} k_0^2 \int_Q G^k(x_j, y) f_i^l(y) dy - \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G^l(x_j, y) f_i^l(y) dy, \quad (16)$$

где координаты точек коллокации имеют вид

$$x_i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3}) \quad x_{i1} = (i_1 + 0,5)h_1, \quad x_{i2} = (i_2 + 0,5)h_2, \quad x_{i3} = (i_3 + 0,5)h_3,$$

$$k, l = 1, 2, 3; \quad i, j = 1, \dots, N.$$

Таким образом, представлены расчетные формулы для матричных коэффициентов метода коллокации.

Так как базисные функции равны 1 только внутри элементарного параллелепипеда  $\Pi_{klm}$ , интегралы в интегральном уравнении вычисляются аналитически. В результате элементы матрицы вычисляются суммированием медленно сходящихся рядов. В полученных рядах целесообразно выделить особенность. Медленно сходящиеся ряды без особенности представлены в [4, 5].

### Численные результаты

Для численного решения задачи разобьем параллелепипед  $Q$  на  $N = n \cdot n \cdot n$  элементарных параллелепипедов. Здесь  $n$  – количество разбиений параллелепипеда  $Q$  по одному направлению. Перебирая всевозможные комбинации пар элементарных параллелепипедов, заполняем матричные элементы с помощью формулы (21). Для перебора удобно использовать трехиндексную нумерацию параллелепипедов. Правая часть СЛАУ заполняется при помощи формулы (20). Полученную СЛАУ решаем методом сопряженных градиентов. Используя субиерархический метод, значение поля можно вычислить не только для параллелепипеда, но и для фигуры более сложной формы [9, 10].

На рис. 2–3 представлено сравнение поведения полей внутри тела с переменной диэлектрической проницаемостью, расположенного в прямоугольном волноводе. Тело представляет собой секцию волновода в форме прямоугольного параллелепипеда с длиной  $a$  по оси  $x_1$ ,  $b$  по оси  $x_2$  и  $l_2$  по оси  $x_3$ . В области  $0 < x_3 < l_1$  ( $l_1 < l_2$ ) тело имеет постоянную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_1 = 1,4$ , а в области  $l_1 < x_3 < l_2$  тело имеет постоянную диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_2 = 1,9$ . Сетка имеет размер  $n = 8$  по каждому направлению. На рис. 2 и 3 приведены результаты аналитического решения и численного решений. Слева представлены результаты аналитического решения, справа – результаты численного решения.

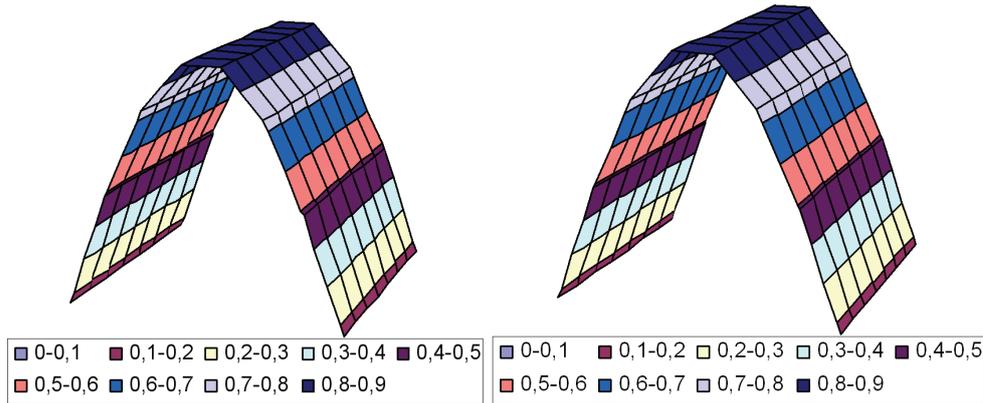


Рис. 2. Третий слой,  $0,5 < x_3 < 0,75$ .

Модуль максимум разности поля на слое равен 0,00724

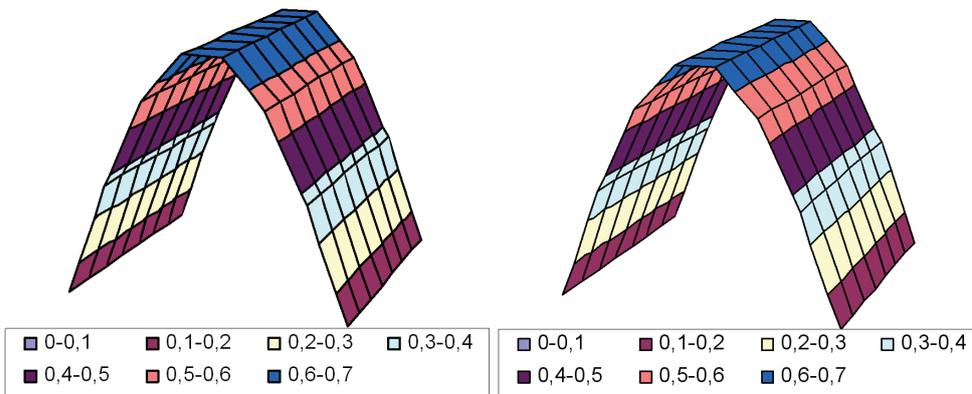


Рис. 3. Шестой слой,  $1,25 < x_3 < 1,5$ .

Модуль максимум разности поля на слое равен 0,01613

Размеры волновода и электродинамические параметры:  $a = 2$ ,  $b = 1$ ,  $c = 2$ ,  $\epsilon_1 = 1,4$ ,  $\epsilon_2 = 1,9$ ,  $k_0 = 2,5$ . В табл. 1 приведены результаты, отображающие максимум модуля разности аналитического и численного решений на каждом слое.

Расчеты показывают хорошее согласие численного решения с аналитическими результатами.

Сравнение аналитического и численного решений

Номер слоя	Граница слоя по $x_3$	Максимум модуля разности
1 слой	$0,0 < x_3 < 0,25$	0,01945
2 слой	$0,25 < x_3 < 0,5$	0,00501
3 слой	$0,5 < x_3 < 0,75$	0,00724
4 слой	$0,75 < x_3 < 1,0$	0,00199
5 слой	$1,0 < x_3 < 1,25$	0,00924
6 слой	$1,25 < x_3 < 1,5$	0,01613
7 слой	$1,5 < x_3 < 1,75$	0,00741
8 слой	$1,75 < x_3 < 2,0$	0,00203

## Список литературы

1. **Самохин, А. Б.** Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – М. : Радио и Связь, 1998.
2. **Гурина, Е. Е.** Численное и аналитическое решение задачи дифракции электромагнитного поля на диэлектрическом параллелепипеде, расположенном в прямоугольном волноводе / Е. Е. Гурина, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 2. – С. 32–43.
3. **Ильинский, А. С.** Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах / А. С. Ильинский, Ю. Г. Смирнов. – М. : Радиотехника, 1996.
4. **Васюнин, Д. И.** Метод коллокации решения объемного сингулярного интегрального уравнения в задаче определения диэлектрической проницаемости материала / Д. И. Васюнин, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 3. – С. 68–78.
5. **Медведик, М. Ю.** Численное решение объемного сингулярного интегрального уравнения методом коллокации / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 4. – С. 55–71.
6. **Смирнов, Ю. Г.** О существовании и единственности решений обратной краевой задачи для определения эффективной диэлектрической проницаемости наноматериалов / Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 1. – С. 11–24.
7. **Shestopalov, Yu. V.** Volume Singular Integral Equations Method for Determination of Effective Permittivity of Meta- and Nanomaterials / Yu. V. Shestopalov, Yu. G. Smirnov, V. V. Yakovlev // Proceedings of Progress in Electromagnetics Research Symposium (PIERS 2008). – Cambridge, USA. – 2008. – July 2–6. – P. 291–292.
8. **Smirnov, Yu. G.** Inverse Boundary Value Problem for Determination of Permittivity of Dielectric Body in a Waveguide Using the Method of Volume Singular Integral Equation / Yu. G. Smirnov // IEEE Transactions on Fundamentals and Materials. – 2009. – V. 129. – № 10. – P. 675–680.
9. **Медведик, М. Ю.** Применение ГРИД-технологий для решения объемного сингулярного интегрального уравнения для задачи дифракции на диэлектрическом теле субиерархическим методом / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2008. – № 2. – С. 2–14.
10. **Смирнов, Ю. Г.** Применение ГРИД-технологий для решения нелинейного объемного сингулярного интегрального уравнения для определения эффективной

диэлектрической проницаемости наноматериалов / Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2008. – № 3. – С. 2–10.

---

**Гришина Елена Евгеньевна**

аспирант, Пензенский государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

**Grishina Elena Evgenyevna**

Postgraduate student,  
Penza State University

**Деревянчук Екатерина Дмитриевна**

студентка, Пензенский государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

**Derevyanchuk Ekaterina Dmitrievna**

Student, Penza State University

**Медведик Михаил Юрьевич**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: \_medv@mail.ru

**Medvedik Mikhail Yuryevich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

**Смирнов Юрий Геннадьевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
математики и суперкомпьютерного  
моделирования, Пензенский  
государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

**Smirnov Yury Gennadyevich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of mathematics and supercomputer  
modeling, Penza State University

---

УДК 517.6

**Гришина, Е. Е.**

**Численное и аналитическое решение задачи дифракции электромагнитного поля на двух секциях с разной диэлектрической проницаемостью, расположенных в прямоугольном волноводе / Е. Е. Гришина, Е. Д. Деревянчук, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 73–81.**

## СУБИЕРАРХИЧЕСКИЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ЛИППМАНА – ШВИНГЕРА

*Аннотация.* Рассмотрено решение интегрального уравнения Липпмана – Швингера. Представлен численный метод Галеркина. Получены численные результаты для расчета акустического поля внутри тела с использованием субиерархического алгоритма.

*Ключевые слова:* субиерархический алгоритм, интегральное уравнение, численный метод, краевая задача.

*Abstract.* This paper is considered solution integral equation of Lippmann – Schwinger. The integral equation is solved by Galerkin method. Numerical results of solving of are obtained by using subhierarchical algorithm by body free form.

*Keywords:* subhierarchical algorithm integral equations, numerical method, boundary value problem.

### Введение

Определение рассеянного поля в различных материалах и средах является актуальной задачей акустики и электродинамики. Так как точные решения задач дифракции могут быть получены лишь для ограниченного числа тел правильной геометрии, то большое значение для практических приложений представляет развитие различных приближенных и численных подходов, справедливых для тел произвольной формы. Таким образом, возникает необходимость разработки новых методов решения подобных задач. Одним из перспективных методов является метод объемных сингулярных интегральных уравнений [1]. С помощью него краевая задача сводится к решению объемного сингулярного интегрального уравнения. Решение получающегося интегрального уравнения в общем случае возможно лишь численными методами, но благодаря снижению размерности задачи за счет сведения к интегралу по поверхности происходит значительное упрощение численных расчетов. Решение таких задач с приемлемой для практики точностью требует очень большого объема вычислений. Представленный в статье метод позволяет решать подобные задачи на телах сложной геометрической формы, опираясь на результаты, полученные при решении задачи на теле базовой формы [2–9].

### Постановка задачи

Рассмотрим задачу дифракции акустической волны на теле  $Q$ , расположенном в свободном пространстве  $R^3$  (рис. 1).

Пусть дано неоднородное уравнение Гельмгольца

$$\Delta u + k^2(x)u = f(x), \quad (1)$$

где  $f(x)$  – известная функция с компактным носителем.

Будем предполагать, что на границе раздела двух сред выполняются условия сопряжения

$$[u]_{\partial Q} = 0, \left[ \frac{\partial u}{\partial n} \right]_{\partial Q} = 0 \quad (2)$$

и условия излучения Зоммерфельда

$$\frac{\partial u}{\partial r} = iku + o\left(\frac{1}{r}\right), r := |x| \rightarrow \infty. \quad (3)$$

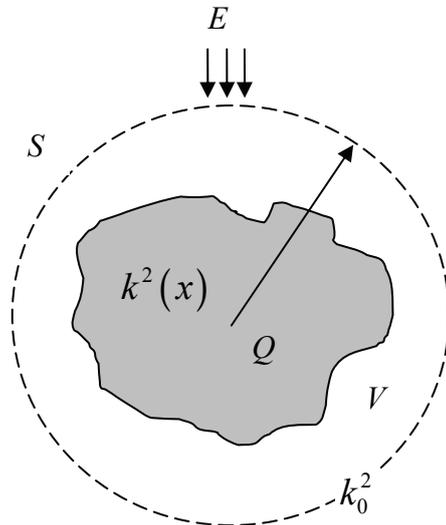


Рис. 1

Представим данное уравнение в виде (1)

$$\Delta u + k_0^2 u = (k_0^2 - k^2(x))u + f(x), \quad (4)$$

где  $k_0$  – волновое число в свободном пространстве;  $k(x)$  – функция, характеризующая волновое число внутри тела  $Q$ .

Обозначим через  $F(x) = (k_0^2 - k^2(x))u + f(x)$  правую часть уравнения (4). Тогда, используя вторую формулу Грина, получаем

$$\begin{aligned} \int_V (\Delta + k_0^2) u(x) G(x, y) - (\Delta + k_0^2) G(x, y) u(x) dx = \\ = \int_S \left( \frac{\partial u(x)}{\partial n} G(x, y) - \frac{\partial G(x, y)}{\partial n} u(x) \right) ds, \end{aligned}$$

где  $S$  – сфера, а  $V$  – ее объем (рис. 1). Учитывая, что  $F(x) = (\Delta + k_0^2)u$ , а  $(\Delta + k_0^2)G(x, y) = \delta(x)$ , приходим к следующей формуле:

$$u(x) = \int_V F(x) G(x, y) dx - \int_S \left( \frac{\partial u(x)}{\partial n} G(x, y) - \frac{\partial G(x, y)}{\partial n} u(x) \right) ds.$$

Интеграл по поверхности  $S$  в правой части уравнения стремится к нулю при  $r \rightarrow \infty$ . Таким образом, задача свелась к следующему уравнению:

$$u(x) = \int_V F(x)G(x, y)dx.$$

Устремим радиус  $S$  к бесконечности и перейдем от  $V$  к  $R^3$ . Учитывая, что  $F(x) = (k_0^2 - k^2(x))u + f(x)$ , получаем

$$u(x) = \int_Q G(x, y)(k_0^2 - k^2(y))u(y)dy + \int_{R^3} f(y)G(x, y)dy.$$

Обозначим в правой части уравнения интеграл через

$$f^0(x) = \int_{R^3} f(y)G(x, y)dy.$$

В результате приходим к уравнению, известному в литературе как интегральное уравнение Липпмана – Швингера:

$$u(x) = f^0(x) + \int_Q G(x, y)(k_0^2 - k^2(y))u(y)dy. \quad (5)$$

Это уравнение играет чрезвычайно важную роль не только в акустических задачах дифракции, но также в электродинамике, квантовой механике и во многих других областях физики.

Для однородного тела, т.е. такого, для которого  $k(x) = \text{const}$ , уравнение модифицируется и принимает вид

$$u(x) = f^0(x) + k_1^2 \int_Q G(x, y)u(y)dy. \quad (6)$$

Уравнение (5) является уравнением Фредгольма второго рода. К нему применима известная теория Фредгольма. Вопросы единственности и существования решения данного уравнения рассмотрены в [10].

### **Метод Галеркина**

Рассмотрим  $n$ -мерное пространство  $V_n$ . Проведем аппроксимацию элементов  $\psi$  элементами  $\psi_n \in V_n$ . Методом Галеркина находим  $\psi_n$  из системы уравнений

$$(L\psi_n, v) = (f, v). \quad (7)$$

Эти уравнения определяют конечномерный оператор  $L_n: V_n \rightarrow V'_n$ , где  $V'_n$  есть *антидуальное* пространство к  $V_n$ .

В качестве базисных функций выберем функции  $v_k^1$ . Будем считать, что  $Q$  – параллелепипед:  $Q = \{x: a_1 < x_1 < a_2, b_1 < x_2 < b_2, c_1 < x_3 < c_2\}$ . Разобьем  $Q$  на элементарные параллелепипеды рис. 2:

$$\Pi_{klm} = \{x : x_{1,k} < x_1 < x_{1,k+1}, x_{2,l} < x_2 < x_{2,l+1}, x_{3,m} < x_3 < x_{3,m+1}\},$$

$$x_{1,k} = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{n} k, x_{2,l} = b_1 + \frac{b_2 - b_1}{n} l, x_{3,m} = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{n} m,$$

где  $k, l, m = 0, \dots, n - 1$ . Объем любого параллелепипеда  $\Pi_{klm}$  равен  $\text{vol}$ .

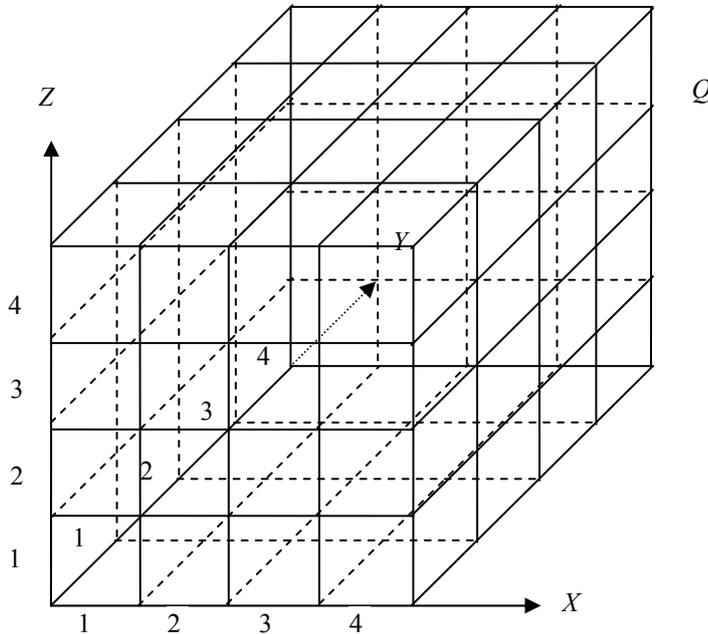


Рис. 2

Базисные функции  $v_{klm}^i, i = 1, 2, 3$ , определяются следующим образом:

$$v_{klm}^i = \begin{cases} 1, & x \in \bar{\Pi}_{klm}, \\ 0, & x \notin \bar{\Pi}_{klm}. \end{cases}$$

Построенное множество базисных функций удовлетворяет необходимому условию аппроксимации [11] в  $L_2^3 = L_2 \times L_2 \times L_2$ .

Описанный выше метод приводит к решению матричного уравнения. Произведем перебор всех пар элементарных параллелепипедов. Каждый элемент матрицы получается путем вычисления шестикратного интеграла

$$L_{i,j} = \text{vol} \cdot \delta_{i,j} - \int_{\Omega} G(x,y) \psi_i(x) \cdot v_j(y) ds,$$

имеющего слабую особенность в области интегрирования. Процедура избавления от особенности представлена в [4, 7]. Правая часть матричного уравнения задается формулой

$$f_j = \int_{\Omega} f \psi_j ds. \text{ Здесь } x = (x_1, x_2, x_3), y = (y_1, y_2, y_3), \text{ а } G(x,y) = \frac{e^{ik|x-y|}}{|x-y|} - \text{ известная функция.}$$

Решение СЛАУ производится методом сопряженных градиентов.

### Субиерархический алгоритм

Алгоритм расчета акустического поля внутри фигуры в форме параллелепипеда  $Q$  описан выше. Рассмотрим алгоритм расчета акустического поля для тела сложной геометрической формы. Будем предполагать, что решение задачи тела  $Q$  получено, и в нашем распоряжении находится матрица, составленная методом Галеркина. Для решения задачи дифракции акустической волны на теле сложной формы необходимо, чтобы тело целиком вмещалось в параллелепипед  $Q$  и состояло из элементов сетки [3–10]. Субиерархический метод позволяет составить матрицу для определения акустических полей внутри тела сложной конфигурации, используя матрицу, составленную для параллелепипеда  $Q$ . В построенной фигуре введем новую нумерацию элементарных параллелепипедов. Произведя полный перебор всех элементарных параллелепипедов, принадлежащих фигуре сложной конфигурации, получаем новую сетку. Эту сетку будем использовать для расчета поля на теле сложной формы. Решая СЛАУ для матрицы, составленной с использованием новой сетки, находим значения поля внутри фигуры сложной формы. Скорость построения новой матрицы будет напрямую зависеть от размера фигуры и размера сетки. Субиерархический подход позволяет избежать длительных расчетов, связанных с вычислением матричных элементов.

### Численные результаты

На рис. 3–5 приведен расчет значений акустического поля внутри тела сложной геометрической конфигурации. Параллелепипед  $Q$  покрыли равномерной сеткой  $11 \times 11 \times 11$  элементов, используя субиерархический алгоритм, произвели расчет поля на представленной ниже фигуре. Первые четыре слоя по направлению оси  $OZ$  фигуры имеют вид, представленный на рис. 3, следующие три слоя фигуры представлены на рис. 4, последние четыре слоя изображены на рис. 5.

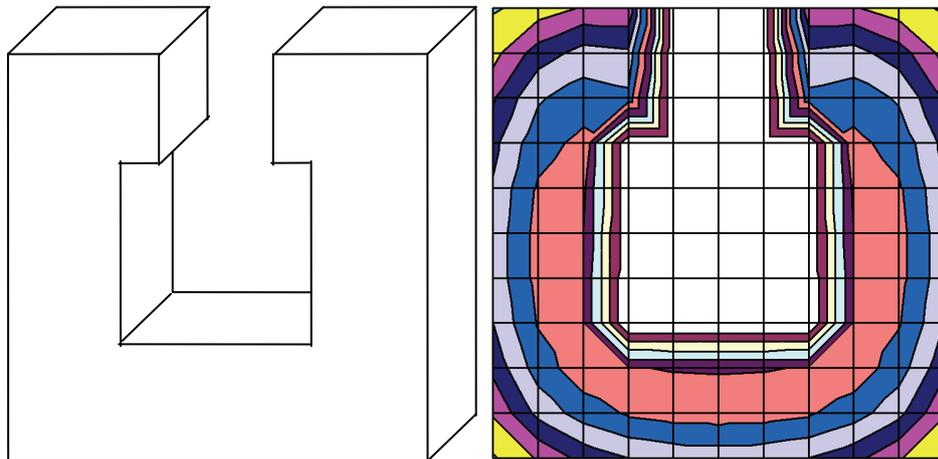


Рис. 3. Значение модуля акустического поля во втором сечении фигуры перпендикулярно оси  $OZ$

Преимущества субиерархического метода особенно хорошо заметны при расчете серии задач на телах различной конфигурации.

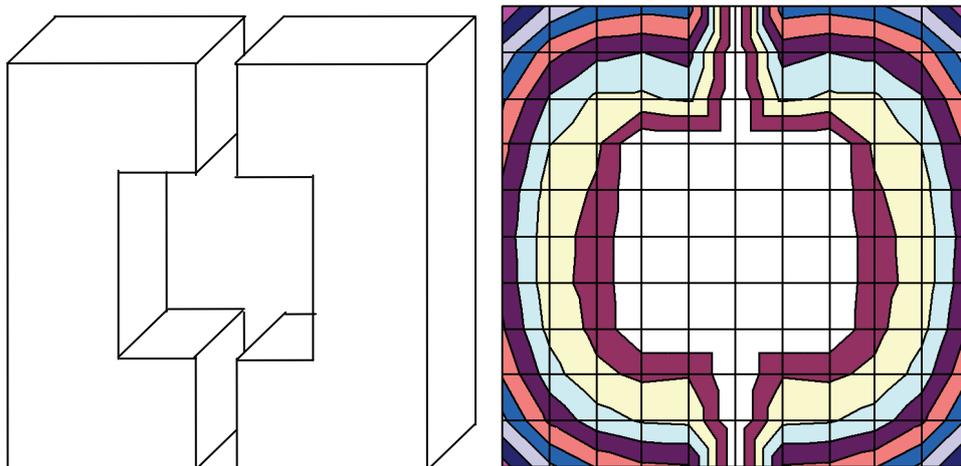


Рис. 4. Значение модуля акустического поля  
в пятом сечении фигуры перпендикулярно оси  $OZ$

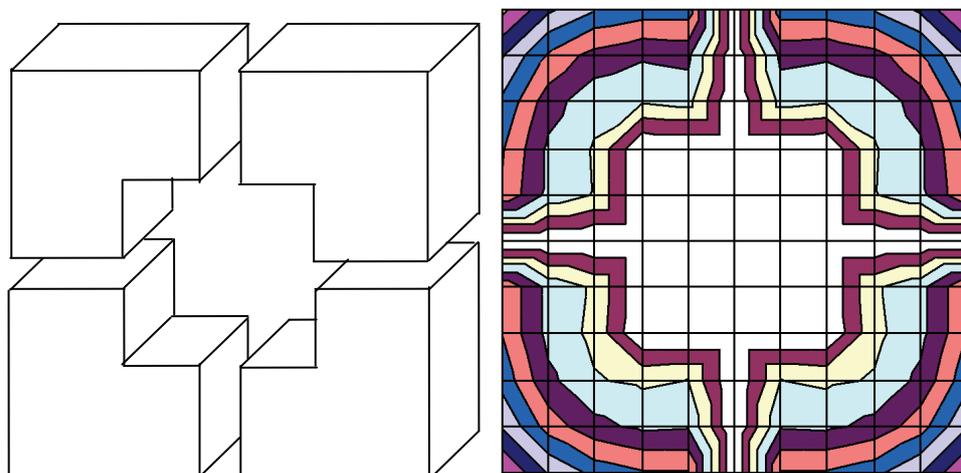


Рис. 5. Значение модуля акустического поля  
в восьмом сечении фигуры перпендикулярно оси  $OZ$

### Список литературы

1. **Самохин, А. Б.** Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – М. : Радио и Связь, 1998.
2. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический метод решения интегрального уравнения на плоских экранах произвольной формы / М. Ю. Медведик // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 4. – С. 49–55.
3. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический параллельный вычислительный алгоритм для решения задач дифракции электромагнитных волн на плоских экранах / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Радиотехника и электроника. – 2008. – Т. 53. – № 4. – С. 441–446.
4. **Медведик, М. Ю.** Применение ГРИД-технологий для решения объемного сингулярного интегрального уравнения для задачи дифракции на диэлектрическом теле субиерархическим методом / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия

- тия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2008. – № 2. – С. 2–14.
5. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический параллельный вычислительный алгоритм и сходимость метода Галеркина в задачах дифракции электромагнитного поля на плоском экране / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2004. – № 5. – С. 3–19. – (Естественные науки).
  6. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический подход для решения объемного сингулярного интегрального уравнения задачи дифракции на диэлектрическом теле в волноводе методом коллокации / М. Ю. Медведик, Д. А. Миронов, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 2. – С. 32–43.
  7. **Медведик, М. Ю.** Субиерархический метод для решения псевдодифференциального уравнения в задаче дифракции в слоях, связанных через отверстие / М. Ю. Медведик, И. А. Родионова // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 3. – С. 59–71.
  8. **Антонов, А. В.** Разработка Web-ориентированного вычислительного комплекса для решения трехмерных векторных задач дифракции электромагнитных волн на основе субиерархических параллельных алгоритмов и ГРИД-технологий / А. В. Антонов, М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов. // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2007. – № 4. – С. 51–60.
  9. **Медведик, М. Ю.** Параллельный алгоритм расчета поверхностных токов в электромагнитной задаче дифракции на экране / М. Ю. Медведик, Ю. Г. Смирнов, С. И. Соболев // Вычислительные методы и программирование. – 2005. – Т. 6. – С. 99–108.
  10. **Колтон, Д.** Методы интегральных уравнений в теории рассеяния / Д. Колтон, Р. Кресс. – М. : Мир, 1987.
  11. **Kress, R.** Linear Integral Equations / R. Kress // Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag. – New-York, 1989. – V. 82.

---

**Медведик Михаил Юрьевич**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: [\\_medv@mail.ru](mailto:_medv@mail.ru)

**Medvedik Mikhail Yuryevich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

---

УДК 517.3

**Медведик, М. Ю.**

**Субиерархический метод решения интегрального уравнения Липпмана – Швингера** / М. Ю. Медведик // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 82–88.

## МЕТОД КОЛЛОКАЦИИ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

*Аннотация.* Предложен метод коллокации как альтернатива методу Галеркина, для решения псевдодифференциального уравнения электрического поля.

*Ключевые слова:* прямое и обратное преобразование Фурье, псевдодифференциальный оператор, псевдодифференциальное уравнение, метод коллокаций.

*Abstract.* Collocation method (alternative to Galerkin method) for solving pseudodifferential equation of electric field is suggested.

*Keywords:* direct and inverse Fourier transform, pseudodifferential operator, pseudodifferential equation, collocation method.

### 1. Постановка задачи

Рассмотрим следующую задачу дифракции. Пусть в свободном пространстве  $R^3$  расположено объемное тело (область)  $Q$  с границей  $\partial Q$  класса  $C^\infty$ , характеризующееся постоянной магнитной проницаемостью  $\mu_0$  и  $3 \times 3$ -матрицей-функцией (тензором) диэлектрической проницаемости  $\hat{\epsilon}(x)$ . Компонентами тензора  $\hat{\epsilon}(x)$  являются  $\epsilon_{ij}(x)$  – бесконечно гладкие функции в  $\bar{Q}$ , т.е.  $\epsilon_{ij}(x) \in C^\infty(\bar{Q})$ , причем  $\epsilon_{ij}(x) = \epsilon'_{ij}(x)/\epsilon_0$ , где  $\epsilon_0$  – диэлектрическая проницаемость свободного пространства.

Из условия конечности энергии необходимо [1], чтобы  $\mathbf{E} \in L_2(Q) = L_2(Q) \times L_2(Q) \times L_2(Q)$ .

Требуется определить электромагнитное поле  $\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_2(Q)$ , возбуждаемое сторонним полем  $\mathbf{E}^0, \mathbf{H}^0$  с временной зависимостью вида  $e^{-i\omega t}$ .

Будем искать электромагнитное поле  $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ , удовлетворяющее уравнениям Максвелла, условиям непрерывности касательных компонент поля при переходе через границу тела и условиям излучения на бесконечности [1].

Задача отыскания  $\mathbf{E}, \mathbf{H}$  сводится к решению интегродифференциального уравнения [1]

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\theta}}(x)\mathbf{J}(x) &= \mathbf{E}^0(x) + k_0^2 \int_Q \hat{\mathbf{G}}_E(x, y)\mathbf{J}(y)dy + \\ &+ \text{grad div} \int_Q \hat{\mathbf{G}}_E(x, y)\mathbf{J}(y)dy, \quad x \in Q, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\mathbf{J}(y) = (J_1(y), J_2(y), J_3(y))^T$ .

Считаем, что  $\hat{\boldsymbol{\theta}}(x) := (\hat{\epsilon}(y) - \mathbf{I})^{-1}$  существует при всех  $x \in \bar{Q}$  и  $\mathbf{J}(y) := (\hat{\epsilon}(y) - \mathbf{I})\mathbf{E}(y)$ , тогда  $\mathbf{E}(y) = \hat{\boldsymbol{\theta}}(y)\mathbf{J}(y)$ ;  $\mathbf{E}(y) = (E_1(y), E_2(y), E_3(y))^T$  –

(комплекснозначный) вектор электрического поля и  $y = (y_1, y_2, y_3)$  – точка

в пространстве  $R^3$ ;  $\mathbf{I}$  – единичная  $3 \times 3$ -матрица;  $\bar{\mathbf{G}}_E(x, y) = \begin{pmatrix} G_E^1 & 0 & 0 \\ 0 & G_E^2 & 0 \\ 0 & 0 & G_E^3 \end{pmatrix}$  –

тензорная функция Грина, где  $G_E^m(x, y) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ik_0|x-y|}}{|x-y|} + g^m(x, y)$ ,  $x, y \in \bar{Q}$ ,

$g^m \in C^\infty(\bar{Q} \times \bar{Q})$  – гладкая функция, ( $m = 1, 2, 3$ );  $k_0$  – волновое число свободного пространства.

Уравнение (1) как псевдодифференциальное запишется в виде [2]<sup>1</sup>

$$A\mathbf{J} = \mathbf{E}^0, \quad (2)$$

где

$$A\mathbf{J} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iint e^{i(x-y) \cdot \xi} (\bar{\boldsymbol{\theta}}(x) - \mathbf{dt}(\xi)) \mathbf{J}(y) dy d\xi, \quad (3)$$

$$\text{и } \mathbf{dt}(\xi) = -t(\xi) \begin{pmatrix} \xi_1^2 - k_0^2 & \xi_1 \xi_2 & \xi_1 \xi_3 \\ \xi_1 \xi_2 & \xi_2^2 - k_0^2 & \xi_2 \xi_3 \\ \xi_1 \xi_3 & \xi_2 \xi_3 & \xi_3^2 - k_0^2 \end{pmatrix}, \quad t(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{p_n (1 - ik_0)}{|\xi|^{2n}}, \quad p_1 = 1.$$

В работе [2] относительно оператора  $A$  доказаны следующие теоремы.

**Теорема 1.1.** Если выполняются условия:

1) матрица  $\bar{\boldsymbol{\theta}}(x) := (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(y) - \mathbf{I})^{-1}$  существует при всех  $x \in \bar{Q}$ ;

2)  $\Delta(x) = \sum_{i,j=1}^3 \cos \alpha_i \cos \alpha_j \varepsilon_{ij}(x) \neq 0$ ,  $x \in \bar{Q}$ , и  $\cos^2 \alpha_1 + \cos^2 \alpha_2 +$

$+\cos^2 \alpha_3 = 1$ , то оператор  $A: H_{\text{comp}}^s(Q) \rightarrow H_{\text{loc}}^s(Q)$ , определенный по формуле (3), является эллиптическим псевдодифференциальным оператором (ПДО).

**Теорема 1.2.** Пусть выполнены условия теоремы 1.1. Тогда, если дополнительно выполнено одно из двух условий:

1)  $\text{Re} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) v \cdot \bar{v} \geq (C_2 + 1) |v|^2$ , при  $x \in \bar{Q}$  и  $C_2 > 0$ ;

2)  $\text{Im} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}(x) v \cdot \bar{v} \geq C_3 |v|^2$ , при  $x \in \bar{Q}$ ,

то оператор  $A: \mathbf{L}_2(Q) \rightarrow \mathbf{L}_2(Q)$ , определенный формулой (3), является фредгольмовым с нулевым индексом.

Нас будет интересовать часть главного символа, которая определяется выражением

<sup>1</sup> Далее во всех интегралах, где пределы интегрирования не указаны явно, считаем, что интегрирование ведется по всему пространству.

$$\mathbf{a}(\xi) = \frac{1}{|\xi|^2} \begin{pmatrix} \xi_1^2 & \xi_1\xi_2 & \xi_1\xi_3 \\ \xi_1\xi_2 & \xi_2^2 & \xi_2\xi_3 \\ \xi_1\xi_3 & \xi_2\xi_3 & \xi_3^2 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

## 2. Метод коллокации

Сначала кратко опишем общую схему метода коллокации, а затем применим ее к уравнению (1) (или (2)).

Для уравнения  $A\varphi = f$  ( $\varphi, f \in X$ ) в гильбертовом пространстве  $X$  рассмотрим метод коллокации, который формулируется следующим образом. Приближенное решение  $\varphi_n \in X_n$  определяется из уравнения  $P_n A\varphi_n = P_n f$ . Здесь  $\varphi_n \in X_n$  ( $X_n$  есть  $n$ -мерное подпространство пространства  $X$ ),  $P_n : X \rightarrow X_n$  – оператор проектирования на конечномерное подпространство, который определяется ниже.

Разобьем область  $Q$  на элементарные подобласти  $Q_i$  с кусочно-гладкими границами  $\partial Q_i$  так, чтобы выполнялись условия  $Q_i \cap Q_j = \emptyset$  при  $i \neq j$  и  $\bar{Q} = \bigcup_i \bar{Q}_i$ . Выберем в каждой подобласти  $Q_i$  точку (узел) коллокации

$x^i$ . Рассмотрим базисные функции  $v_i = \begin{cases} 1, & x \in Q_i \\ 0, & x \notin Q_i \end{cases}$ . Пусть подпространства  $X_n$

являются линейными оболочками базисных функций:  $X_n = \text{span}\{v_1, \dots, v_n\}$ .

Потребуем, чтобы для выбранных базисных функций выполнялось условие аппроксимации:

$$\forall x \in X \lim_{n \rightarrow \infty} \inf_{\bar{x} \in X_n} \|x - \bar{x}\| = 0.$$

Проектор  $P_n : X \rightarrow X_n$  определим так:  $(P_n \varphi)(x) = \varphi(x^i)$ ,  $x \in Q_i$ . Заметим, что при таком определении проектора не определены значения функций  $(P_n \varphi)(x)$  при  $x \in \partial Q_i$ , но это не будет важно, так как в нашем случае  $X = L_2$ .

Уравнение  $P_n A\varphi_n = P_n f$  эквивалентно следующему:

$$(A\varphi_n)(x^j) = f(x^j), \quad j = 1, \dots, n.$$

Представим приближенное решение в виде линейной комбинации базисных функций:  $\varphi_n = \sum_{k=1}^n c_k v_k$ . Подставив это представление в схему метода коллокации, получим систему линейных алгебраических уравнений для отыскания неизвестных коэффициентов  $c_k$ :

$$\sum_{k=1}^n c_k (Av_k)(x^j) = f(x^j), \quad j = 1, \dots, n.$$

Основная трудность применения метода коллокации в данной работе связана с тем, что в качестве пространства  $X$  рассматривается пространство  $\mathbf{L}_2 = L_2 \times L_2 \times L_2$ , в котором значения функции в точке, вообще говоря, не определены. Таким образом, оператор проектирования  $P_n : X \rightarrow X_n$  определен не на всем пространстве  $X$  и, вообще говоря, не ограничен. Это приводит к тому, что нельзя применить стандартные утверждения о сходимости проекционных методов. Однако в нашем случае правая часть  $f$  является гладкой функцией, и функция  $A\varphi_n$  тоже будет определена в точках коллокации (что будет показано ниже). Поэтому дадим следующее

**Определение 2.1.** Метод коллокации будем называть *сходящимся* для оператора  $A$  и  $f \in \text{Im } A$ , если существует число  $N$  такое, что приближенные уравнения  $(A\varphi_n)(x^j) = f(x^j)$ ,  $j = 1, \dots, n$ , имеют единственное решение  $\varphi_n \in X_n$  для всех  $n \geq N$ , и если эти решения сходятся  $\varphi_n \rightarrow \varphi$  при  $n \rightarrow \infty$  к единственному решению  $\varphi$  уравнения  $A\varphi = f$ .

Рассмотрим вопрос о построении схемы для метода коллокации для уравнения (1).

Представим уравнение (1) в виде системы трех скалярных уравнений:

$$\sum_{i=1}^3 \xi_{li} J^i(x) - k_0^2 \int_Q G_E^l(x, y) J^l(y) dy - \\ - \frac{\partial}{\partial x_l} \text{div}_x \int_Q \widehat{\mathbf{G}}_E(x, y) \mathbf{J}(y) dy = E^{0l}(x), \quad l = 1, 2, 3.$$

Определим компоненты приближенного решения  $\mathbf{J}_n = (J_n^1, J_n^2, J_n^3)$  следующим образом:

$$J_n^1 = \sum_{k=1}^n a_k f_k(x), \quad J_n^2 = \sum_{k=1}^n b_k f_k(x), \quad J_n^3 = \sum_{k=1}^n c_k f_k(x),$$

где  $f_k$  – базисные функции-«ступеньки».

Ниже проводится построение функций  $f_k$ . Будем считать, что  $Q$  – параллелепипед:  $Q = \{x : a_1 < x_1 < a_2, \quad b_1 < x_2 < b_2, \quad c_1 < x_3 < c_2\}$ .

Разобьем  $Q$  элементарными параллелепипедами  $Q_j = \Pi_{klm}$ :

$$\Pi_{klm} = \left\{ x : x_{1,k} < x_1 < x_{1,k+1}, \quad x_{2,l} < x_2 < x_{2,l+1}, \quad x_{3,m} < x_3 < x_{3,m+1} \right\}; \\ x_{1,k} = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{n}(k-1), \quad x_{2,l} = b_1 + \frac{b_2 - b_1}{n}(l-1), \quad x_{3,m} = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{n}(m-1),$$

где  $k, l, m = 1, \dots, n$ .

Получим формулы для  $f_{klm}$ :

$$f_{klm} = \begin{cases} 1, & x \in \Pi_{klm}, \\ 0, & x \notin \Pi_{klm}. \end{cases}$$

Построенное множество базисных функций удовлетворяет необходимому условию аппроксимации в  $\mathbf{L}_2 = L_2 \times L_2 \times L_2$ .

Расширенную матрицу для нахождения неизвестных коэффициентов  $a_k, b_k, c_k$  удобно представить в блочной форме:

$$\left( \begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & A_{13} & B_1 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & B_2 \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & B_3 \end{array} \right),$$

где элементы столбцов  $B_k$  и матриц  $A_{kl}$  определяются из соотношений

$$B_k^i = E_0^k(x_i);$$

$$A_{kl}^{ij} = \delta_{ij} \xi_{kl} - \delta_{kl} k_0^2 \int_Q G_E^k(x^j, y) f_i(y) dy - \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G_E^l(x^j, y) f_i(y) dy, \quad (5)$$

а координаты точки коллокации имеют вид

$$x^j = (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3}), \quad x_{j1} = (i_1 + 1/2)h_1, \quad x_{j2} = (i_2 + 1/2)h_2, \quad x_{j3} = (i_3 + 1/2)h_3,$$

$$h_1 = \frac{a_2 - a_1}{n}, \quad h_2 = \frac{b_2 - b_1}{n}, \quad h_3 = \frac{c_2 - c_1}{n}, \quad k, l = 1, 2, 3; \quad i, j = 1, \dots, N; \quad N = n^3.$$

Таким образом, представлены расчетные формулы для матричных коэффициентов метода коллокации для решения сингулярного интегро-дифференциального уравнения.

Докажем прежде всего, что значения матричных коэффициентов действительно могут быть вычислены в точках коллокации  $x^i = (x_{i1}, x_{i2}, x_{i3})$ . Для этого достаточно рассмотреть интегралы вида  $\frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G_E^l(x^j, y) f_i(y) dy$ ,

так как остальные интегралы, входящие в (5), очевидно могут быть вычислены в точках коллокации, поскольку они определяются как значения непрерывных функций в точке. Более того, вышеуказанный интеграл можно заменить интегралом

$$I_j^{kl} \equiv I^{kl}(x^j) := -\frac{\partial}{\partial x_k} \int_{Q_j} \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{1}{|x^j - y|} dy, \quad (6)$$

оставив только часть, которая может содержать особенность. Используя метод псевдодифференциальных операторов, можно представить интеграл

$$I^{kl}(x) := -\frac{\partial}{\partial x_k} \int_{Q_j} \frac{\partial}{\partial x_l} \frac{1}{|x - y|} dy \quad (7)$$

в виде действия ПДО на базисную функцию и вычислить его аналитически.

Учитывая формулу (4), можно показать, что интеграл (7) будет иметь вид

$$I^{kl}(y) = \frac{1}{\pi^3} \iiint e^{i(y_1\xi_1 + y_2\xi_2 + y_3\xi_3)} \sin \frac{\xi_1 h_1}{2} \sin \frac{\xi_2 h_2}{2} \sin \frac{\xi_3 h_3}{2} \frac{\xi_k \xi_l d\xi}{\xi_1 \xi_2 \xi_3 |\xi|^2},$$

где  $\frac{1}{\xi_1 \xi_2 \xi_3} \sin \frac{\xi_1 h_1}{2} \sin \frac{\xi_2 h_2}{2} \sin \frac{\xi_3 h_3}{2} = \frac{1}{8} \int_{-h_3/2}^{h_3/2} \int_{-h_2/2}^{h_2/2} \int_{-h_1/2}^{h_1/2} e^{-i(x_1 \xi_1 + x_2 \xi_2 + x_3 \xi_3)} dx$  есть

преобразование Фурье элементарного параллелепипеда  $\Pi_{klm}$ , центр которого расположен в начале координат, а ребра параллельны координатным осям.

Интегралы  $I^{kl}$  в точке коллокации  $y_1 = y_2 = y_3 = 0$  вычислены в п. 3. Приведем здесь значения этих интегралов:

$$I^{11} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{h_2 h_3}{h_1 \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}} = \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{h_2 h_3}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2} \sqrt{h_1^2 + h_3^2}};$$

$$I^{22} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{h_1 h_3}{h_2 \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}} = \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{h_1 h_3}{\sqrt{h_1^2 + h_2^2} \sqrt{h_2^2 + h_3^2}};$$

$$I^{33} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{h_1 h_2}{h_3 \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}} = \frac{2}{\pi} \arcsin \frac{h_1 h_2}{\sqrt{h_1^2 + h_3^2} \sqrt{h_2^2 + h_3^2}};$$

$$I^{12} = I^{21} = I^{23} = I^{32} = I^{13} = I^{31} = 0,$$

что совпадает со значениями из [1, с. 121]. Отметим, что  $I^{ll}(x^j) > 0$ ,  $l = 1, 2, 3$ .

Таким образом, интегралы (6) (значения интегралов (7) в точках коллокации) ограничены константой, не зависящей от шагов  $h_1, h_2, h_3$ . Остальные части в формуле (5) представляются непрерывными функциями и также могут быть ограничены константой, не зависящей от шагов  $h_1, h_2, h_3$ . Следовательно, мы получаем следующее

**Утверждение 2.1.** *Существует константа  $M$  такая, что для коэффициентов (5) верно неравенство  $|A_{kl}^{ij}| \leq M$ , причем  $M$  не зависит от  $h_1, h_2, h_3$  и  $i, j, k, l$ .*

Наша ближайшая цель – доказать разрешимость конечномерных уравнений. Для этого докажем вспомогательное утверждение.

Введем  $n$ -мерные пространства  $R_1^n, R_2^n$  и  $R_\infty^n$  с нормами, соответственно,

$$\|b\|_1 \equiv \sum_{i=1}^n |b_i|, \quad \|b\|_2 \equiv \sqrt{\sum_{i=1}^n |b_i|^2}, \quad \|b\|_\infty \equiv \max_{1 \leq i \leq n} |b_i|,$$

где  $b = (b_1, \dots, b_n)^T$ .

Будем рассматривать конечномерные (матричные) операторы  $A_n : R_1^n \rightarrow R_\infty^n$ . Соответствующая операторная (матричная) норма имеет вид

$$\|A_n\|_{1 \rightarrow \infty} = \max_{1 \leq i, j \leq n} |a_{ij}^{(n)}|,$$

где  $a_{ij}^{(n)}$  – коэффициенты матрицы  $A_n = \{a_{ij}^{(n)}\}_{i,j=1}^n$ . Действительно, если

$$A_n b = c, \quad b \in R_1^n, \quad c \in R_\infty^n, \quad \text{то}$$

$$\|c\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} |(A_n b)_i| = \max_{1 \leq i \leq n} \left| \sum_{j=1}^n a_{ij}^{(n)} b_j \right| \leq \left( \max_{1 \leq i \leq n} \max_{1 \leq j \leq n} |a_{ij}^{(n)}| \right) \|b\|_1.$$

Перебирая поочередно векторы  $b$ , имеющие только одну ненулевую компоненту, легко найти вектор, при котором указанное выше неравенство перейдет в равенство, что и доказывает формулу для нормы.

Рассмотрим матричное уравнение

$$(A_n + B_n)b = c, \quad (8)$$

где  $A_n : R_1^n \rightarrow R_\infty^n$ ,  $B_n : R_1^n \rightarrow R_\infty^n$ ,  $b \in R_1^n$ ,  $c \in R_\infty^n$ .

**Лемма 2.1.** Если существует обратная матрица  $A_n^{-1}$  и для всех  $n$  верна оценка  $\|B_n\|_{1 \rightarrow \infty} < \frac{1}{\|A_n^{-1}\|_{\infty \rightarrow 1}}$ , то уравнение (8) имеет единственное решение при всех  $n$ .

**Доказательство.** При выполнении условий леммы уравнение (8) можно переписать в виде  $A_n(I + A_n^{-1}B_n)b = c$ . Так как  $\|A_n^{-1}B_n\|_{1 \rightarrow 1} \leq \|A_n^{-1}\|_{\infty \rightarrow 1} \|B_n\|_{1 \rightarrow \infty} < 1$ , то решение уравнения (8) существует и единственно, и имеет вид  $b = (I + A_n^{-1}B_n)^{-1} A_n^{-1}c$ .

Если  $A_n : R_\infty^n \rightarrow R_1^n$  и все  $a_{ij}^{(n)} \geq 0$  (или все  $a_{ij}^{(n)} \leq 0$ ) или матрица является диагональной ( $a_{ij}^{(n)} = \delta_{ij} a_{ii}^{(n)}$ ), то для соответствующей операторной (матричной) нормы верна формула

$$\|A_n\|_{\infty \rightarrow 1} = \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}^{(n)}|, \quad (9)$$

где  $a_{ij}^{(n)}$  – коэффициенты матрицы  $A_n = \{a_{ij}^{(n)}\}_{i,j=1}^n$ .

Действительно, если  $A_n b = c$ ,  $b \in R_\infty^n$ ,  $c \in R_1^n$ , то

$$\|c\|_1 = \sum_{i=1}^n |(A_n b)_i| = \sum_{i=1}^n \left| \sum_{j=1}^n a_{ij}^{(n)} b_j \right| \leq \left( \sum_{i,j=1}^n |a_{ij}^{(n)}| \right) \|b\|_\infty.$$

Если все компоненты вектора  $b$  равны между собой, то указанное выше неравенство перейдет в равенство с учетом условия  $a_{ij}^{(n)} \geq 0$  или  $a_{ij}^{(n)} \leq 0$ . Если матрица является диагональной, то можно выбрать вектор  $b$  с компонентами  $b_i = \text{sign}(a_{ii}^{(n)})$ . Тогда снова неравенство перейдет в равенство, что и доказывает формулу для нормы.

Рассмотрим конечномерные уравнения метода коллокации:

$$A_N u = b, \quad (10)$$

где

$$A_N = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \end{pmatrix}, \quad u = \begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \\ J_3 \end{pmatrix}.$$

**Теорема 2.1.** Пусть тензор  $\bar{\varepsilon}(x) \in C(\bar{Q})$  диагональный, вещественнозначный и  $\varepsilon_{ll}(x) > 1$ ,  $x \in \bar{Q}$  ( $l=1,2,3$ ). Тогда существует  $N_0$  такое, что при  $N \geq N_0$  решения уравнений (10) существуют и единственны.

*Доказательство.* Из условий теоремы сразу следует, что матрица  $(\bar{\varepsilon}(x) - \mathbf{I}) \in C(\bar{Q})$  обратима в  $\bar{Q}$ ,  $(\bar{\varepsilon}(x) - \mathbf{I})^{-1} \in C(\bar{Q})$ .

Представим матричные коэффициенты (5) в виде

$$A_{kl}^{ij} = C_{kl}^{ij} + D_{kl}^{ij}, \quad \text{где } C_{kl}^{ij} = \delta_{ij} (\xi_{kl} + I^{kl}(x^j)),$$

$$D_{kl}^{ij} = -\delta_{kl} k_0^2 \int_Q G_E^k(x^j, y) f_i(y) dy - \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G_E^l(x^j, y) f_i(y) dy - \delta_{ij} I^{kl}(x^j).$$

Запишем уравнение (10) в виде

$$(C_N + D_N)u = b$$

с матрицами  $C_N$  и  $D_N$ , имеющими коэффициенты  $C_{kl}^{ij}$  и  $D_{kl}^{ij}$  соответственно. Из утверждения 2.1 следует, что для коэффициентов матрицы  $D_N$  выполняются неравенства  $|D_{kl}^{ij}| \leq M$ . Матрица  $C_N$  является диагональной и, очевидно, обратима (здесь мы учли, что  $I^{ll}(x^j) \geq 0$ ,  $l=1,2,3$ ). Неотрицательны будут и все элементы диагональной матрицы  $C_N^{-1}$ . Тогда для нормы обратной матрицы  $C_N^{-1}$  верна формула (9). Ясно, что  $\|C_N^{-1}\|_{\infty \rightarrow 1} = O^*(N)$  при  $N \rightarrow \infty$  (здесь символ  $F = O^*(N)$  означает, что существуют не зависящие от  $N$  константы  $C_1 > 0$  и  $C_2 > 0$  такие, что верно неравенство  $C_1 N \leq |F| \leq C_2 N$ ). По-

сколькx интегралы, входящие в  $D_{kl}^{ij}$ , берутся либо от ограниченных функций, либо от функций, имеющих особенность  $O(r^{-1})$ , для нормы будет верна оценка  $\|D_N\|_{1 \rightarrow \infty} = O(N^{-2})$  при  $N \rightarrow \infty$ . Действительно, интеграл

$$\int_{Q_j} \frac{1}{|x^j - y|} dy$$

легко оценить, заменив интегрирование по параллелепипеду  $Q_j$  интегралом по описанному около параллелепипеда  $Q_j$  шару (от той же функции), и вычислить последний интеграл явно в сферических координатах. Таким образом, применима лемма 2.1.

Для доказательства теоремы остается заметить, что левая часть неравенства в оценке в лемме 2.1 стремится к 0 быстрее, чем правая часть, поэтому начиная с некоторого  $N_0$  эта оценка будет выполняться и, следовательно, уравнения (10) будут однозначно разрешимы.

Доказанная теорема 2.1 устанавливает разрешимость конечномерных уравнений в методе коллокации при некоторых ограничениях на тензор  $\bar{\epsilon}(x)$ . Заметим, что эти ограничения выделяют широкий класс диэлектриков, используемых на практике.

### 3. Вычисление интегралов

Рассмотрим интеграл

$$I^{ij} = \frac{1}{\pi^3} \iiint e^{i(y_1 \xi_1 + y_2 \xi_2 + y_3 \xi_3)} \sin \frac{\xi_1 h_1}{2} \sin \frac{\xi_2 h_2}{2} \sin \frac{\xi_3 h_3}{2} \frac{\xi_i \xi_j d\xi}{\xi_1 \xi_2 \xi_3 |\xi|^2}. \quad (11)$$

Мы считаем, что  $I^{ij} \equiv I^{ij}(y_1, y_2, y_3)$ . Достаточно вычислить интегралы только двух типов  $I^{kl}$  при  $k \neq l$  и  $I^{kk}$  для любых конкретных  $k, l = 1, 2, 3$ , значения остальных интегралов можно получить из соображений симметрии. Далее мы будем работать с интегралами  $I^{ij} \equiv I^{ij}(0, 0, 0)$ , т.е. со значениями рассматриваемого интеграла в точке коллокации. Легко видеть, что замена  $h_i := h_i/2$ ,  $i = 1, 2, 3$  не изменяет  $I^{ij}(0, 0, 0)$ , будем этим пользоваться для сокращения записи.

Рассмотрим  $I^{12}$ , поскольку подынтегральная функция нечетна по  $\xi_1$  (и по  $\xi_2$ ), то

$$I^{12} = \frac{1}{\pi^3} \iiint \sin(\xi_1 h_1) \sin(\xi_2 h_2) \sin(\xi_3 h_3) \frac{d\xi}{\xi_3 |\xi|^2} = 0.$$

Отсюда получаем, что  $I^{12} = I^{21} = I^{23} = I^{32} = I^{13} = I^{31} = 0$ .

Заметим, что интеграл  $I^{12}(y_1, y_2, y_3)$  можно вычислить точно даже в произвольной точке  $y$ .

Еще один интеграл типа  $I^{ij}$ , который необходимо вычислить, это

$$I^{22} = \frac{1}{\pi^3} \iiint \sin(\xi_1 h_1) \sin(\xi_2 h_2) \sin(\xi_3 h_3) \frac{\xi_2 d\xi}{\xi_1 \xi_3 |\xi|^2}. \quad (12)$$

Сначала вычислим через вычеты интеграл по  $\xi_2$ , получим

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \sin(\xi_2 h_2) \frac{\xi_2 d\xi_2}{|\xi|^2} = \pi e^{-h_2 \xi'}, \text{ где } \xi' = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_3^2}.$$

Теперь в оставшемся двойном интеграле используем формулу Эйлера  $\sin x = \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}$  и переходим к полярным координатам:  $\xi_1 = \rho \cos \varphi$ ,  $\xi_2 = \rho \sin \varphi$ . Здесь, учитывая формулу

$$\int_0^{\infty} \frac{e^{-\mu x} - e^{-\nu x}}{x} dx = \ln \frac{\nu}{\mu}, \quad (13)$$

где  $\operatorname{Re} \mu > 0$  и  $\operatorname{Re} \nu > 0$  [3, с. 348] и проводя простые преобразования, получаем

$$I^{22} = \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi/2} \ln \frac{h_2^2 (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi) + (h_1 + h_3 \operatorname{tg} \varphi)^2}{h_2^2 (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi) + (h_1 - h_3 \operatorname{tg} \varphi)^2} \frac{d\varphi}{\operatorname{tg} \varphi \cos^2 \varphi} - \frac{1}{2\pi^2} \int_0^{\pi/2} \ln \frac{h_2^2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi) + (h_1 - h_3 \operatorname{ctg} \varphi)^2}{h_2^2 (1 + \operatorname{ctg}^2 \varphi) + (h_1 + h_3 \operatorname{ctg} \varphi)^2} \frac{d\varphi}{\operatorname{ctg} \varphi \sin^2 \varphi}.$$

Теперь в первом интеграле делаем замену  $t = \operatorname{tg} \varphi$ , а во втором —  $t = \operatorname{ctg} \varphi$ , после некоторых преобразований получаем, что

$$I^{22} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^{\infty} \ln \frac{h_2^2 (1 + t^2) + (h_1 + h_3 t)^2}{h_2^2 (1 + t^2) + (h_1 - h_3 t)^2} \frac{dt}{t}.$$

В последнем интеграле, раскладывая числитель и знаменатель под знаком логарифма на множители, интегрируя по частям, используя формулу  $\int_0^{\infty} \frac{\ln x dx}{(x + \beta)(x + \gamma)} = \frac{(\ln \beta)^2 - (\ln \gamma)^2}{2(\beta - \gamma)}$  [3, с. 547] и помня о том, что

$\ln(-1) = \pi i + 2\pi i k$ ,  $k \in \mathbb{R}$ , получаем

$$I^{22} = \frac{1}{\pi^2} \left( 2\pi i (1 + k + l) \ln \sqrt{\frac{h_1^2 + h_2^2}{h_2^2 + h_3^2}} + 2\pi (l - k) \operatorname{arctg} \frac{h_1 h_3}{h_2 \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}} \right).$$

Легко видеть из (12), что  $\text{Im} I^{22} = 0$ , отсюда получаем, что  $1 + k + l = 0$ . Можно показать, что  $I^{22} \Big|_{h_1=h_2=h_3=1} = \frac{1}{3}$  (также см. [1]). Учитывая последнее, получаем, что  $l - k = 1$ . Отсюда находим, что  $k = -1$ ,  $l = 0$ . Окончательно имеем

$$I^{22} = \frac{2}{\pi} \text{arctg} \frac{h_1 h_3}{h_2 \sqrt{h_1^2 + h_2^2 + h_3^2}}.$$

*Замечание.* Интеграл  $I^{22}$  не отражен в известных справочниках [3, 4].

Теперь можно выписать значения остальных интегралов в точках коллокации, просто циклически переставляя индексы (см. п. 2).

В качестве модельного примера можно рассматривать куб со стороной  $h = 1$ , т.е.  $h_1 = h_2 = h_3 = 1$ . Из предыдущих формул получаем

$$I^{11} = I^{22} = I^{33} = \frac{1}{3}.$$

Поясним кратко, как вычисляется интеграл

$$I = \frac{1}{\pi^3} \iiint \sin \xi_1 \sin \xi_2 \sin \xi_3 \frac{\xi_2 d\xi}{\xi_1 \xi_3 |\xi|^2} = \frac{1}{3},$$

который есть  $I^{22} \Big|_{h_1=h_2=h_3=1}$ . Схема такова: сначала берется через вычеты интеграл по  $\xi_3$ , затем вводятся полярные координаты и используется формула (13), затем полученный однократный интеграл от тригонометрических функций после некоторых преобразований сводится к интегралам

$$\int_0^{\pi/2} \ln(1 + p \sin x) \frac{dx}{\sin x} = \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} (\arccos p)^2;$$

$$\int_0^{\pi/2} \ln(1 + p \cos x) \frac{dx}{\cos x} = \frac{\pi^2}{8} - \frac{1}{2} (\arccos p)^2, \quad p^2 \leq 1$$

(последние интегралы при  $p^2 < 1$  приведены в [3]).

#### Список литературы

1. **Самохин, А. Б.** Итерационные методы в электромагнитном рассеянии / А. Б. Самохин. – М. : Радио и связь, 1998.
2. **Валовик, Д. В.** Метод псевдодифференциальных операторов для исследования объемного сингулярного интегрального уравнения электрического поля / Д. В. Валовик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2009. – № 4. – С. 70–84.
3. **Градштейн, И. С.** Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – М. : Физматгиз, 1962.
4. **Прудников, А. П.** Интегралы и ряды. Элементарные функции / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев. – М. : Наука, 1981. – Т. 1.

***Валовик Дмитрий Викторович***

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра математики  
и суперкомпьютерного моделирования,  
Пензенский государственный  
университет

E-mail: dvalovik@mail.ru

***Valovik Dmitry Viktorovich***

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of mathematics  
and supercomputer modeling,  
Penza State University

***Смирнов Юрий Геннадьевич***

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
математики и суперкомпьютерного  
моделирования, Пензенский  
государственный университет

E-mail: mmm@pnzgu.ru

***Smirnov Yury Gennadyevich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of sub-department  
of mathematics and supercomputer  
modeling, Penza State University

---

УДК 517.9, 519.6

**Валовик, Д. В.**

**Метод коллокации для решения уравнения электрического поля /**  
Д. В. Валовик, Ю. Г. Смирнов // Известия высших учебных заведений. По-  
волжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). –  
С. 89–100.

## ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ ГЛОБАЛЬНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО СФЕРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

*Аннотация.* Предложен алгоритм определения коэффициентов Фурье в разложении по сферическим функциям потенциальных полей в предположении, что потенциальные поля известны своими значениями на неравномерной сетке узлов, заданной в некоторой части поверхности Земли. Метод основан на использовании полиномов Бернштейна для продолжения потенциальных полей на всю поверхность Земли и последующем применении кубатурных формул.

*Ключевые слова:* коэффициенты Фурье, сферические функции, потенциальные поля, полиномы Бернштейна, кубатурные формулы.

*Abstract.* In the paper the algorithm of definition of Fourier coefficients in decomposition of potential fields on spherical functions. The potential fields are known by its values on a non-uniform grid of units, given in some part of the Earth surface. The method is based on the Bernshtein multinomials using for continuation of potential fields on all surface of the Earth and subsequent application of the cubature formulas.

*Keywords:* Fourier coefficients, spherical functions, potential fields, Bernshtein polynomials, cubature formulas.

### Введение

Задачи глобального гармонического сферического анализа и синтеза восходят к классическим работам К. Гаусса [1, 2] и Ф. Нейманна [3, 4] по теории земного магнетизма.

Несмотря на то, что и К. Гаусс, и Ф. Нейманн проводили вычисления вручную, предложенные ими алгоритмы представляют интерес и в настоящее время.

И К. Гаусс, и Ф. Нейманн при построении глобального сферического гармонического синтеза использовали двухступенчатый метод.

Алгоритм К. Гаусса заключался в том, что на первом шаге применялось преобразование Фурье по переменной  $\varphi$  (здесь используется сферическая система координат  $(\rho, \theta, \varphi)$ , в которой  $\theta$  – долгота,  $\varphi$  – широта). На втором шаге – метод наименьших квадратов.

Алгоритм Ф. Нейманна отличался от алгоритма К. Гаусса на втором шаге. Вместо метода наименьших квадратов он применял квадратурные формулы наивысшей алгебраической степени точности.

Метод Нейманна получил в дальнейшем широкое распространение в различных разделах геофизики. Он используется в топографии [5, 6], в физике атмосферы [7], в геодезии [8–10].

Впоследствии оба метода были использованы в работах по глобальному сферическому гармоническому анализу.

Приведем краткий обзор работ по двуступенчатому методу в задачах глобального сферического гармонического синтеза (ГСГС) и глобального сферического гармонического анализа (ГСГА).

Пусть функция  $f(\theta, \varphi)$  на сферической поверхности  $S$  разлагается в ряд по сферическим функциям

$$\begin{aligned} f(\theta, \varphi) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^n \widehat{P}_n^m(\cos \theta) (C_{nm} \cos m\varphi + S_{nm} \sin m\varphi) = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} K(n, m) \widehat{P}_n^m(\cos \theta) (C_{nm} \cos m\varphi + S_{nm} \sin m\varphi) = \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=m}^{\infty} \widehat{P}_n^m(\cos \theta) (C_{nm} \cos m\varphi + S_{nm} \sin m\varphi) = \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} A_m(\theta) \cos m\varphi + B_m(\theta) \sin m\varphi, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $A_m(\theta) = \sum_{n=m}^{\infty} \widehat{P}_n^m(\cos \theta) (C_{nm})$ ,  $B_m(\theta) = \sum_{n=m}^{\infty} \widehat{P}_n^m(\cos \theta) (S_{nm})$ ,  $K(n, m) = 1$  при  $n \geq m$ ,  $K(n, m) = 0$  при  $n < m$ ,  $\widehat{P}_n^m(\cos \theta)$  – нормированные присоединенные функции Лежандра,

$$\widehat{P}_n^m(t) = \sqrt{\frac{(2n+1)(n-m)!}{2(n+m)!} \frac{(1-t^2)^{m/2}}{2^n n!} \frac{d^{n+m}(t^2-1)^n}{dt^{n+m}}},$$

где  $t = \cos \theta$ .

Глобальный сферический гармонический анализ заключается в нахождении коэффициентов  $C_{nm}$  и  $S_{nm}$  из разложения (1) функции  $f(\theta, \varphi)$  по сферическим функциям.

Используя ортогональность тригонометрических полиномов и присоединенных полиномов Лежандра, из разложения (1) имеем

$$\begin{cases} C_{nm} \\ S_{nm} \end{cases} = \frac{1}{(1 + \delta_{m0})\pi} \iint_S f(\theta, \varphi) \widehat{P}_n^m(\cos \theta) \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases} ds, \quad (2)$$

где  $ds = \sin \theta d\theta d\varphi$ ,  $S = [0, \pi; 0, 2\pi]$ ,  $\delta_{m0} = \begin{cases} 1, m = 0 \\ 0, m \neq 0 \end{cases}$ .

Применяя к формуле (2) кубатурные формулы, можно вычислить коэффициенты  $C_{nm}$  и  $S_{nm}$ .

Двухступенчатый ГСГА состоит в том, что последовательно проводятся вычисления по переменным  $\varphi$  и  $\theta$ . В двухступенчатом ГСГА вычисления проводятся в обратном порядке – сначала проводятся вычисления по  $\theta$ , а затем – по  $\varphi$ .

Остановимся на этих алгоритмах подробнее.

Алгоритм двухступенчатого ГСГА заключается в том [11], что вначале вычисляются функции

$$\begin{cases} A_m(\theta) \\ B_m(\theta) \end{cases} = \frac{1}{(1 + \delta_{m0})} \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} f(\theta, \varphi) \begin{cases} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{cases} d\varphi, \quad (3)$$

а затем вычисляются коэффициенты

$$\begin{cases} C_{nm} \\ S_{nm} \end{cases} = \frac{1 + \delta_{m0}}{4} \int_0^\pi \begin{cases} A_m(\theta) \\ B_m(\theta) \end{cases} \bar{P}_n^m(\cos\theta) \sin\theta d\theta. \quad (4)$$

Двухступенчатый ГСГС заключается [11] в том, что вначале проводится суммирование по параметру  $n$

$$\begin{cases} A_m(\theta) \\ B_m(\theta) \end{cases} = \sum_{n=m}^{\infty} \bar{P}_n^m(\cos\theta) \begin{cases} C_{nm} \\ S_{nm} \end{cases}, \quad (5)$$

а затем вычисляются значения функции

$$f(\theta, \varphi) = \sum_{m=0}^{\infty} (A_m(\theta) \cos m\varphi + B_m(\theta) \sin m\varphi). \quad (6)$$

Алгоритмы сферического анализа и синтеза развивались в работах [9, 12, 13].

Непосредственное применение формул (3), (4) возможно только при небольших значениях  $n$  и  $m$ . Поэтому необходима дискретизация этих формул.

Основная проблема при этом заключается в том, что после дискретизации присоединенные полиномы Лежандра оказываются неортогональными.

Это накладывает дополнительные трудности на решение задачи ГГСА даже при условии, что дана равномерная сетка узлов на всей сферической поверхности.

Помимо алгоритмов двухступенчатого глобального сферического гармонического синтеза разработан и внедрен в геофизическую практику алгоритм «столбцового» типа [14], вычисления потенциальных полей во внешности сферы.

Для вычисления отрезков ряда по шаровым функциям

$$U(x) = \frac{1}{r^\nu} \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n \frac{P_n^m(\cos\theta)}{r^n} (a_{nm} \cos m\varphi + b_{nm} \sin m\varphi),$$

где  $\nu > 0$  – целое число;  $P_n^m(\cos\theta)$  – присоединенные функции Лежандра;  $x = (x_1, x_2, x_3)$ ,  $(r, \varphi, \theta)$  – сферические координаты, в [14] построены четырехчленные рекурсивные соотношения, связывающие присоединенные функции Лежандра  $\bar{P}_n^m$ , нормированные следующим образом:

$$\bar{P}_n^m(\cos\theta) = \frac{n!}{(n+m)!} P_n^m(\cos\theta).$$

Алгоритм «столбцового» типа позволяет проводить устойчивый синтез потенциальных полей при  $N \geq 180$  с высокой точностью [14].

В работе [15] описана методика синтеза потенциальных полей на персональных компьютерах в среде MathLab<sup>TM</sup>, позволяющая осуществлять синтез до  $N = 75$ .

Как отмечалось выше, в ГСГА потенциальных полей широко используется метод наименьших квадратов. Однако этот метод, как показано в [16], требует очень большого числа наблюдений.

Метод наименьших квадратов эффективно применяется в случае, если задана равномерная по широте и долготе сетка наблюдений. Однако в геодезической практике такая сетка отсутствует, в частности, из-за проблемы полярных областей. В работе [13] отмечается, что в полярных областях отсутствует регулярная сетка спутниковых наблюдений и ее приходится дополнять наземными и авиационными съемками.

В связи с этим в [13] предложен алгоритм, основанный на методе наименьших квадратов и позволяющий использовать информацию, полученную как из спутниковых, так и из наземных и аэроизмерений.

Представляет значительный теоретический и практический интерес построение численных методов нахождения коэффициентов Фурье сферических функций по информации о потенциальных полях, заданной на неравномерной сетке узлов в некоторой области, не включающей полярные области.

В данной работе предложен метод решения этой проблемы.

### **1. Вспомогательные предложения**

В работе [17] описан алгоритм продолжения потенциальных полей, заданных в ограниченной области, расположенной на сфере, на всю сферу. В основу этого алгоритма положено известное [18] свойство полиномов Бернштейна равномерно приближать целые функции. Построение классического полинома Бернштейна требует знания информации об аппроксимируемой функции на равномерной сетке узлов.

В геофизической практике затруднительно провести равномерную съемку на достаточно больших территориях, поэтому представляет интерес построение модификаций полиномов Бернштейна, использующих неравномерные сетки узлов.

Рассмотрим сегмент  $[0,1]$ , на котором имеется  $N$  узлов  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_N = 1$ . Пусть  $\Delta_k = [x_k, x_{k+1}]$ ,  $k = 0, 1, \dots, N-1$ ,  $h_k = x_{k+1} - x_k$ ,  $k = 0, 1, \dots, N-1$ . Будем считать выполненным условие  $h^*/h_* \leq m$ , где  $h^* = \max h_k$ ,  $h_* = \min h_k$ ,  $k = 0, 1, \dots, N-1$ ,  $m$  – целое число.

Построим следующую модификацию полиномов Бернштейна:

$$\tilde{P}_N(x) = \sum_{k=0}^N C_N^k f(x_k) x^k (1-x)^{N-k}. \quad (7)$$

Повторяя рассуждения, приведенные в [18], можно показать, что для непрерывной функции  $f(x)$ ,  $x \in [0,1]$ ,  $\lim_{N \rightarrow \infty} \|f(x) - \tilde{B}_N(x)\| \rightarrow 0$  при выполнении условия  $h^*/h_* \leq m$ ,  $m = \text{const}$ .

Точно также, повторяя доказательство теоремы Т. Поповичу [18, с. 245–246], можно показать, что для модифицированных полиномов Бернштейна справедлива оценка

$$|f(x) - \tilde{B}_N(x)| \leq \frac{3m}{2} \omega\left(f; \frac{1}{\sqrt{N}}\right),$$

где  $\omega(f, \delta)$  – модуль непрерывности функции  $f(x)$ .

Известна [18, с. 254] теорема Л. В. Канторовича, утверждающая, что если  $f(x)$  есть целая функция, то ее полином Бернштейна

$$B_N(x) = \sum_{k=0}^N C_N^k f\left(\frac{k}{N}\right) x^k (1-x)^{N-k}$$

сходится к ней на всей числовой оси.

Повторяя рассуждения, приведенные в [18, с. 254–256], можно показать, что если  $U(x)$  – сужение на числовую ось гармонической функции, то последовательность полиномов Бернштейна сходится к этой функции.

## 2. Численный двухступенчатый алгоритм ГГСА, основанный на экстраполяции полей и применении кубатурных формул

Введем сферическую систему координат  $(r, \theta, \varphi)$  с центром в центре сферы  $S$  радиуса  $R$ . Пусть известны значения потенциального поля  $U(R, \theta, \varphi)$  в области  $\Omega$  на поверхности сферы, определяемой неравенствами  $0 < \alpha_1 \leq \theta \leq \alpha_2 < \pi$ ,  $0 < \beta_1 \leq \varphi \leq \beta_2 < 2\pi$ . Положим  $\beta_1 = 0, \beta_2 = 2\pi$ , т.е.  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Ограничение, связанное с предположением, что  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ , не влияет на общность рассуждений.

Предлагаемый алгоритм ГГСА состоит из двух этапов.

### Первый этап

На первом этапе, располагая значениями потенциального поля на поверхности  $\Omega \subset S$ , продолжаем его на поверхность сферы  $S$  радиуса  $R$ .

Пусть значения функции  $U(R, \theta, \varphi)$  заданы на прямоугольной сетке узлов  $\{\theta_k, \varphi_l\}$ ,  $k = 1, 2, \dots, M_1$ ,  $l = 1, 2, \dots, N_1$ , причем эта сетка неравномерная ни по переменной  $\theta$ , ни по переменной  $\varphi$ . По узлам  $\{\theta_k, \varphi_l\}$ ,  $k = 1, 2, \dots, M_1$ ,  $l = 1, 2, \dots, N_1$ , построим полином Бернштейна:

$$\begin{aligned} \tilde{B}_{M_1, N_1}(\theta, \varphi) = & \sum_{k=1}^{M_1} \sum_{l=1}^{N_1} C_{M_1}^k C_{N_1}^l U(R, \theta_k, \varphi_l) \left( \frac{\theta - \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} \right)^k \left( 1 - \frac{\theta - \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} \right)^{M_1 - k} \times \\ & \times \left( \frac{\varphi - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \right)^l \left( 1 - \frac{\varphi - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \right)^{N_1 - l}. \end{aligned}$$

Полином Бернштейна  $\tilde{B}_{M_1, N_1}(\theta, \varphi)$  аппроксимирует функцию  $U(R, \theta, \varphi)$  в области  $\Omega$ .

Теперь введем в области  $\Omega$  равномерную сетку узлов:

$$\left\{ \alpha_1 + (\alpha_2 - \alpha_1) \frac{k}{n_1}, \beta_1 + (\beta_2 - \beta_1) \frac{l}{n_1} \right\}, \quad k, l = 0, 1, \dots, n_1.$$

По значениям полинома Бернштейна  $\tilde{B}_{M_1, N_1}(\theta, \varphi)$  на равномерной сетке узлов строится новый полином Бернштейна:

$$B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi) = \sum_{k=0}^{n_1} \sum_{l=0}^{n_1} C_{n_1}^k C_{n_1}^l \tilde{B}_{M_1, N_1} \left( \alpha_1 + (\alpha_2 - \alpha_1) \frac{k}{n_1}, \beta_1 + (\beta_2 - \beta_1) \frac{l}{n_1} \right) \times \\ \times \left( \frac{\theta - \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} \right)^k \left( 1 - \frac{\theta - \alpha_1}{\alpha_2 - \alpha_1} \right)^{n_1 - k} \left( \frac{\varphi - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \right)^l \left( 1 - \frac{\varphi - \beta_1}{\beta_2 - \beta_1} \right)^{n_1 - l}.$$

*Замечание.* Необходимость в построении этого полинома обусловлена тем, что теорема Канторовича о сходимости последовательности полиномов Бернштейна к целым функциям доказана для полиномов Бернштейна, построенных на равномерных сетках узлов.

Полином  $B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi)$  аппроксимирует функцию  $U(R, \theta, \varphi)$  на сфере  $S$ .

*Замечание.* В случае, если нужная точность восстановления функции  $U(R, \theta, \varphi)$  полиномом  $B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi)$  не достигается во всей области  $S$  одновременно, то, как отмечается в [17], можно построить последовательность полиномов Бернштейна, определенных на последовательности областей, сходящейся к  $S$ .

Построением полинома  $B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi)$  заканчивается первый этап алгоритма.

### **Второй этап**

Располагая значениями полинома  $B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi)$  на поверхности  $S$ , вычислим коэффициенты Фурье по сферическим функциям. Для этого воспользуемся формулой

$$\begin{Bmatrix} C_{nm} \\ S_{nm} \end{Bmatrix} = \frac{1}{(1 + \delta_{m0})\pi} \iint_S B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi) \bar{P}_n^m(\cos \theta) \begin{Bmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{Bmatrix} ds. \quad (8)$$

Перейдем в (8) к сферической системе координат. Воспользовавшись формулой интегрирования по сфере [19], имеем

$$\begin{Bmatrix} C_{nm} \\ S_{nm} \end{Bmatrix} = \frac{1}{(1 + \delta_{m0})\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi) \bar{P}_n^m(\cos \theta) \begin{Bmatrix} \cos m\varphi \\ \sin m\varphi \end{Bmatrix} \sin \theta d\theta d\varphi. \quad (9)$$

Так как значения функции  $B_{n_1, n_1}^*(\theta, \varphi)$  легко вычисляются при любых значениях  $(\theta, \varphi)$ , то для вычисления интеграла из правой части формулы (9) можно использовать различные кубатурные формулы.

По переменной  $\varphi$  естественно воспользоваться квадратурной формулой по равноотстоящим узлам, которая является формулой наивысшей тригонометрической степени точности. Для вычисления интеграла по переменной  $\theta$  можно воспользоваться квадратурной формулой Гаусса  $n$ -го порядка.

В результате получаем формулу

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} C_{nm} \\ S_{nm} \end{matrix} \right\} &= \frac{1}{(1 + \delta_{m0})\pi} \frac{2\pi}{M} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^M \alpha_k^{(N)} B_{n_1, n_1}^* \left( x_k^{(N)}, \frac{2\pi l}{M} \right) \times \\ &\times \bar{P}_n^m \left( \cos x_k^{(N)} \right) \left\{ \begin{matrix} \cos \frac{2\pi ml}{M} \\ \sin \frac{2\pi ml}{M} \end{matrix} \right\} \sin x_k^{(N)} + R_{NM}(U), \end{aligned} \quad (10)$$

где  $\left\{ \alpha_k^{(N)}, x_k^{(N)} \right\}$  – коэффициенты и узлы квадратурной формулы Гаусса;  $R_{NM}(U)$  – погрешность квадратурной формулы (10).

При реализации кубатурной формулы (10) возможны два подхода. Во-первых, можно взять достаточно большое значение  $M$ , а значение  $N$  взять равным  $n$ . При этом при каждом значении  $n$  приходится брать новые наборы весов и узлов квадратурной формулы Гаусса. Во-вторых, можно взять достаточно большое значение  $N$  и  $M$ .

Наряду с формулой (10) вычисление коэффициентов Фурье сферических функций можно проводить по кубатурным формулам с равноотстоящими узлами:

$$\begin{aligned} \left\{ \begin{matrix} C_{nm} \\ S_{nm} \end{matrix} \right\} &= \frac{1}{(1 + \delta_{m0})NM} \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^M B_{n_1, n_1}^* \left( \frac{\pi k}{N}, \frac{2\pi l}{M} \right) \times \\ &\times \bar{P}_n^m \left( \cos \frac{\pi k}{N} \right) \left\{ \begin{matrix} \cos \frac{2\pi ml}{M} \\ \sin \frac{2\pi ml}{M} \end{matrix} \right\} \sin \frac{\pi k}{N} + R_{NM}(U). \end{aligned} \quad (11)$$

### 3. Модельный пример

Введем декартову систему координат  $OXYZ$ . Пусть в точке с координатами  $(30, 30, 30)$  находится точечное тело с массой  $\mu = 100$ , создающее потенциальное поле  $U(x, y, z)$ .

Введем сферическую систему координат  $(\rho, \theta, \varphi)$  с полюсом в начале декартовой системы координат. Пусть потенциальное поле  $U(x, y, z)$  известно на поверхности  $\{\rho = R = 10, 10^\circ \leq \theta \leq 80^\circ, 0 \leq \varphi \leq 2\pi\}$  и равно

$$U(x, y, z) = \frac{100}{\sqrt{(x-30)^2 + (y-30)^2 + (z-30)^2}}. \quad (12)$$

Требуется определить коэффициенты Фурье сферических функций (2). Для этого будем использовать численный алгоритм, приведенный во втором разделе. Полученные результаты сравниваются с точными значениями коэффициентов Фурье разложения поля по сферическим функциям:

$$C_{nm} = \frac{2(2 - \delta_{m0})\mu}{2n + 1} \frac{R^n}{(r^*)^{n+1}} \cos m\varphi^* \hat{P}_n^m(\cos \theta^*),$$

$$S_{nm} = \frac{2(2 - \delta_{m0})\mu}{2n + 1} \frac{R^n}{(r^*)^{n+1}} \sin m\varphi^* \hat{P}_n^m(\cos \theta^*), \quad (13)$$

где  $(r^*, \theta^*, \varphi^*)$  – координаты источника потенциального поля.

Результаты вычислений приведены на рис. 1.

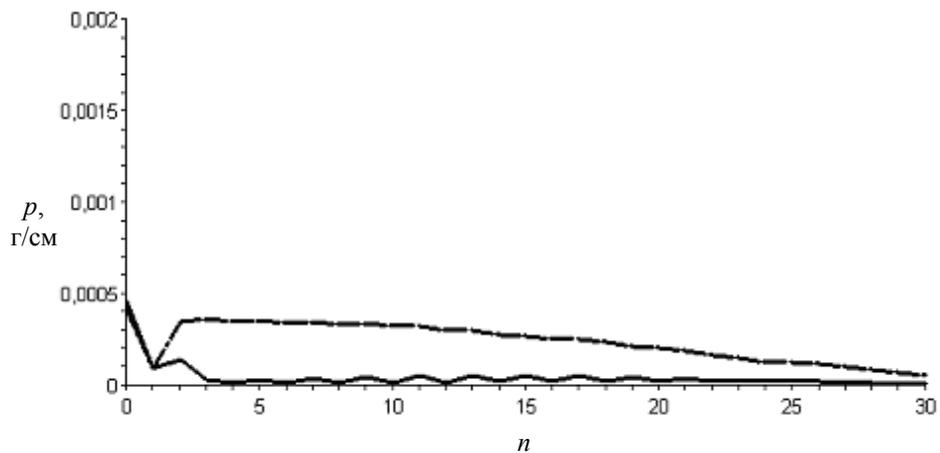


Рис. 1. График погрешности коэффициентов Фурье

На рис. 1  $p(n) = \max_m (|C_{nm} - \tilde{C}_{nm}|)$ , где  $\tilde{C}_{nm}$  – коэффициент, найденный по формуле (10);  $C_{nm}$  – точное значение коэффициента, найденное по формуле (13). Сплошной линией изображен график функции  $p(n)$  при использовании равномерной сетки узлов для построения полиномов Бернштейна. Штрихпунктирной линией показан график функции  $p(n)$  при использовании неравномерной сетки узлов для построения полиномов Бернштейна при соотношении  $h^*/h_k \leq 2$ .

С помощью найденных коэффициентов  $\tilde{C}_{nm}$  и  $\tilde{S}_{nm}$  восстановим функцию  $U(R, \theta, \varphi)$  по формуле для внешней краевой задачи [20]:

$$U_{N'}(r, \theta, \varphi) = \sum_{n=0}^{N'} \sum_{m=0}^n \left(\frac{R}{r}\right)^{n+1} \hat{P}_n^m(\cos \theta) (\tilde{C}_{nm} \cos m\varphi + \tilde{S}_{nm} \sin m\varphi), \quad r \geq R. \quad (14)$$

В табл. 1 представлена максимальная погрешность восстановления функции  $U(R, \theta, \varphi)$ , заданной формулой (12), по формуле (14) при использо-

вании равномерной и неравномерной сетки узлов для построения полиномов Бернштейна.

Таблица 1

N'	Формула	Равномерная сетка		Неравномерная сетка	
		Максимум относительной погрешности, %	Максимум абсолютной погрешности	Максимум относительной погрешности, %	Максимум абсолютной погрешности
10	Гаусса (10)	2,49746E-001	4,28310E-003	3,58967E-001	7,48856E-003
	прямоугольников (11)	1,12281E+000	2,34652E-002	1,08009E+000	2,06412E-002
20	Гаусса (10)	2,21755E-001	4,60688E-003	3,62166E-001	7,59521E-003
	прямоугольников (11)	3,99273E+000	8,43455E-002	3,91479E+000	7,63034E-002
30	Гаусса (10)	2,31276E-001	4,85023E-003	3,47737E-001	7,29261E-003
	прямоугольников (11)	8,92589E+000	1,90004E-001	8,88127E+000	1,79664E-001

### Выводы

В статье предложен алгоритм двухступенчатого глобального сферического гармонического анализа на неравномерной сетке узлов, заданной на части поверхности Земли. На первой ступени алгоритма происходит экстраполяция исходных данных на основании полиномов Бернштейна. На втором этапе вычисляются коэффициенты Фурье по кубатурным формулам. Так как на первом этапе приближенно восстановлено потенциальное поле на всей поверхности Земли, на втором этапе может быть использован и другой математический аппарат, в частности, метод наименьших квадратов с различными базисными функциями.

### Список литературы

1. Гаусс, К. Ф. Избранные труды по земному магнетизму / К. Ф. Гаусс. – Л. : Академия Наук СССР, 1952. – 344 с.
2. Гаусс, К. Ф. Избранные геодезические сочинения / К. Ф. Гаусс. – М. : Геодезиздат, 1957. – 144 с.
3. Neumann, F. Uber eine neue Eigenschaft der Laplaceschen  $y''$  und ihre Anwendung zur analytischen Darstellung derjenigen Phänomene / F. Neumann // Schumachers Astron. Nachr. – 1838. – V. 15. – P. 313–325.
4. Neumann, F. Vorlesungen über die Theorie des Potentials und der Kugelfunctionen / F. Neumann. – Leipzig : Teubner, 1887. – P. 135–154.
5. Prey, A. Darstellung der Hohen- und Tiefenverhältnisse der Erde durch eine Entwicklung nach Kugelfunctionen / A. Prey // Math. Phys. Kl. Neue Folge. – 1922. – V. 11. – № 1. – P. 134–167.
6. Hofsommer, D. J. On the Expansion of a Function in a Series of Spherical Harmonics / D. J. Hofsommer. – Amsterdam : Computation Department of the Mathematical Centre, 1957. – 344 p.
7. Ellsaesser, H. W. Expansion of Hemispheric Meteorological Data in Antisymmetric Surface Spherical Harmonic (Laplace) Series / H. W. Ellsaesser // J. Appl. Meteorology. – 1966. – № 5. – P. 263–276.
8. Payne, M. H. Truncation Effects in Geopotential Modelling / M. H. Payne. – Maryland: Analytical Mechanics Associates, 1971. – 367 p.

9. **Colombo, O. L.** Numerical Methods for Harmonic Analysis on the Sphere / O. L. Colombo. – Ohio : The Ohio State University. Department of Geodetic Science and Surveying, 1981. – 310 p.
10. **Пеллинен, Л. П.** Высшая геодезия (теоретическая геодезия) / Л. П. Пеллинен. – М. : Недра, 1978. – 264 с.
11. **Sneeuw, N.** Global spherical harmonic analysis by least squares and numerical quadrature methods in historical perspective / N. Sneeuw // Geophysical Journal International. – 1994. – V. 118. – № 3. – P. 709–716.
12. **Rizos, C.** An Efficient Computer Technique for the Evaluation of Geopotential from Spherical Harmonic Models / C. Rizos // Aust. J. Geod. Photo. Surv. – 1979. – V. 31. – P. 161–169.
13. **Sanso, F.** Fast spherical collocation theory and examples / F. Sanso, C. C. Tschering // Journal of Geodesy. – 2003. – V. 77. – P. 101–112.
14. **Страхов, В. Н.** Методы синтеза рядов по шаровым функциям, представляющих элементы потенциальных геофизических полей / В. Н. Страхов, А. Б. Ефимов, М. М. Хохрякова // Известия АН СССР. Физика Земли. – 1988. – № 5. – С. 41–57.
15. **Bethencourt, A.** Using personal computers in spherical harmonic synthesis of high degree earth geopotential models / A. Bethencourt, J. Wang, C. Rizos, A. H. W. Kearsley // Dynamic Planet. – 2005. – P. 125–130.
16. **Мориц, Г.** Современная физическая геодезия / Г. Мориц. – М. : Недра, 1983. – 392 с.
17. **Бойков, И. В.** О приближенном методе восстановления потенциальных полей / И. В. Бойков, М. В. Кравченко, В. И. Крючко // Известия РАН. Физика Земли. – 2010. – Т. 46. – № 4. – С. 67–77.
18. **Натансон, И. П.** Конструктивная теория функций / И. П. Натансон. – М. : Государственное издательство технико-теоретической литературы, 1949. – 688 с.
19. **Крылов, В. И.** Приближенное вычисление интегралов / В. И. Крылов. – М. : Наука, 1967. – 500 с.
20. **Тихонов, А. Н.** Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Наука, 2004. – 798 с.

---

***Бойков Илья Владимирович***

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
высшей и прикладной математики,  
Пензенский государственный университет  
E-mail: math@pnzgu.ru

***Boykov Ilya Vladimirovich***

Doctor of physico-mathematical sciences,  
professor, head of sub-department  
of higher and applied mathematics,  
Penza State University

***Кравченко Марина Витальевна***

аспирант, Пензенский  
государственный университет  
E-mail: almar@sura.ru

***Kravchenko Marina Vitalyevna***

Postgraduate student,  
Penza State University

---

УДК 550.831

**Бойков, И. В.**

**Приближенные методы глобального гармонического сферического анализа потенциальных полей** / И. В. Бойков, М. В. Кравченко // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 101–110.

УДК 538.958

*В. В. Карпунин, В. А. Маргулис*

## **РЕЗОНАНСНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КВАНТОВОМ КАНАЛЕ С ПРЯМОУГОЛЬНЫМ ПОТЕНЦИАЛЬНЫМ ПРОФИЛЕМ**

*Аннотация.* Проведено теоретическое исследование поглощения электромагнитного излучения электронами квантового канала, находящимися в поперечном квантуемом магнитном поле. Рассмотрен дополнительный вклад в коэффициент поглощения, обусловленный переворачивающим спин-взаимодействием электронов с оптическими фононами. Установлен резонансный характер поглощения, найдены форма и положение резонансного пика.

*Ключевые слова:* коэффициент поглощения, электрон-фононные переходы с переворотом спина, квантовый канал.

*Abstract.* The absorption of electromagnetic radiation by electrons of a quantum channel in a transverse quantized magnetic field is investigated. The additional contribution in the absorption coefficient stipulated spin flip transitions is considered. The form and position resonance peaks are found.

*Keywords:* absorption coefficient, electron-phonon transitions with spin flip, quantum channel.

### **Введение**

Спин-циклотрон-фононный резонанс в полупроводниках был предсказан в работе [1]. Согласно теории явления, разработанного в [1], поглощение фотона электронами сопровождается переворачивающим спин-взаимодействием электронов с оптическими фононами. Коэффициент поглощения в [1] вычислен во втором порядке теории возмущений по электрон-фотонному и электрон-фононному взаимодействиям. Рассмотрен невырожденный электронный газ. Показано, что резонансное поглощение должно наблюдаться, когда электроны взаимодействуют только с поперечными оптическими фононами. В качестве оператора электрон-фононного взаимодействия использован оператор, ответственный за электронные переходы с переворотом спина, полученный в [2].

Как показано в [3], в полупроводниках с сильной спин-орбитальной связью взаимодействие 3D-электронного газа со звуковыми квантами и поперечными оптическими фононами приводит к спин-магнитофононному резонансу. В работе [3] расчет коэффициента поглощения проведен во втором порядке теории возмущений. Рассмотрен случай невырожденного электронного газа. Получено аналитическое выражение коэффициента поглощения. Установлена форма резонансных кривых, резонансные частоты.

Теоретическое исследование гибридно-примесных резонансов в анизотропных квантовых точках проведено в [4]. Получено выражение коэффици-

ента поглощения, найдены резонансные частоты, форма резонансных кривых, а также исследована зависимость интенсивности пика от квантового числа конечного состояния.

В работе [5] экспериментально исследован циклотронный резонанс (ЦР) электронов в гетероструктуре HgTe/CdHgTe(013) с квантовой ямой шириной 15 нм. Обнаружено большое расщепление линии ЦР, оно обусловлено как спиновым расщеплением, так и непараболичностью закона дисперсии.

Циклотронный резонанс двумерных электронов в квантовых ямах InSb/AlInSb исследован в [6]. Показано, что сильное расщепление линии ЦР наблюдалось даже в слабых магнитных полях. Это обусловлено спин-орбитальным взаимодействием.

В работе [7] теоретически исследован спин-гибридно-фононный резонанс в квантовом канале, где в качестве удерживающего потенциала выбран  $\delta$ -потенциал. Получены аналитические выражения коэффициента поглощения, установлены резонансные частоты, проанализирована зависимость коэффициента поглощения от частоты электромагнитного излучения и магнитного поля.

### Постановка задачи

Целью настоящей работы является исследование спин-гибридно-фононного резонанса в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем. Расчет коэффициента поглощения проведен во втором порядке теории возмущений по электрон-фононному и электрон-фотонному взаимодействиям. Рассматривается невырожденный электронный газ. Общее выражение коэффициента поглощения в этом случае имеет вид [7]

$$\Gamma(\omega) = \frac{2\pi\sqrt{\varepsilon(\omega)}}{c\hbar N_{\mathbf{f}}} V \left( 1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{T}\right) \right) \times \sum_{\alpha\beta} f_0(E_{\alpha}) |\langle \beta, -\mathbf{f} | F | \alpha, 0 \rangle|^2 \delta(E_{\alpha} - E_{\beta} \mp \hbar\omega_q + \hbar\omega), \quad (1)$$

где  $\mathbf{f}$  – волновой вектор фотона;  $\omega_q$  – частота оптического фонона;  $\omega$  – частота фотона;  $f_0(E_{\alpha})$  – функция распределения Больцмана;  $\varepsilon(\omega)$  – вещественная часть диэлектрической проницаемости;  $V$  – нормировочный объем;  $N_{\mathbf{f}}$  – число фотонов в начальном состоянии;  $F$  – оператор возмущения.

Матричный элемент оператора возмущения для перехода  $s = 1 \rightarrow s' = -1$  ( $s$  – спиновый индекс) имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle n', p'_x, -1, -\mathbf{f} | F | n, p_x, 1, 0 \rangle = \\ & = \sum_{n'' p''_x} \frac{\langle n', p'_x, -1, -\mathbf{f} | H_R | n'', p''_x, -1, 0 \rangle \langle n'', p''_x, -1 | H_L | n, p_x, 1 \rangle}{E_{n' p'_x} - E_{n'' p''_x} + \hbar\omega} + \\ & + \sum_{n'' p''_x} \frac{\langle n', p'_x, -1 | H_L | n'', p''_x, 1 \rangle \langle n'', p''_x, 1, -\mathbf{f} | H_R | n, p_x, 1, 0 \rangle}{E_{n p_x} - E_{n'' p''_x} - \hbar\omega}. \end{aligned}$$

Оператор электрон-фотонного взаимодействия при направлении поляризации по оси  $y$  имеет вид

$$H_R = -\frac{ie\hbar}{m^*} \sqrt{\frac{2\pi\hbar N_f}{\epsilon\omega V}} \frac{\partial}{\partial y}.$$

Оператор электрон-фононного взаимодействия, ответственный за переходы с переворотом спина, получен в [2]:

$$H_L = \sum_{\mathbf{q}} d \left( \frac{1}{2N\bar{M}\omega_q\hbar} \right)^{1/2} \begin{pmatrix} 0 & [\mathbf{h}_- \times \mathbf{e}] \\ [\mathbf{h}_+ \times \mathbf{e}] & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times \left\{ \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} + \frac{\hbar\mathbf{q}}{2} \right) + \exp(-i\mathbf{q}\mathbf{r}) b_{\mathbf{q}}^+ \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} - \frac{\hbar\mathbf{q}}{2} \right) \right\}, \quad (2)$$

где  $\mathbf{q}$  – волновой вектор фонона;  $d$  – константа взаимодействия;  $\mathbf{h}_{\pm} = \mathbf{I}_x \pm i\mathbf{I}_y$ ;  $\mathbf{I}_x, \mathbf{I}_y$  – орты, направленные по осям  $x$  и  $y$ ;  $b_{\mathbf{q}}^+, b_{\mathbf{q}}$  – операторы рождения и уничтожения фононов соответственно;  $\bar{M}$  – приведенная масса элементарной ячейки;  $\mathbf{e}$  – единичный вектор поляризации оптического фонона, векторный потенциал однородного и постоянного магнитного поля  $\mathbf{A} = (-Hy, 0, 0)$ .

Невозмущенный электрон-фотонными и электрон-фононными взаимодействиями гамильтониан электронов в квантовом канале

$$H = \frac{1}{2m^*} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + \frac{m^* \omega_0^2 y^2}{2} + U(z) + \frac{g}{2} \mu_0 \boldsymbol{\sigma} \mathbf{H}, \quad (3)$$

где  $\omega_0$  – частота потенциала конфайнмента, электронный  $g$ -фактор;  $m^*$  – эффективная электронная масса;  $\boldsymbol{\sigma}$  – вектор, компонентами которого являются матрицы Паули;  $\mu_0$  – магнетон Бора.

В качестве удерживающего электроны потенциала  $U(z)$  здесь выбрана прямоугольная потенциальная яма. Электронный спектр гамильтониана (3) для случая прямоугольной потенциальной ямы ширины  $a$  запишется в виде

$$E_{np_x s} = \hbar\Omega(n+1/2) + \frac{p_x^2 \omega_0^2}{2m^* \Omega^2} + E + sg\mu_0 H/2, \quad (4)$$

где  $p_x$  – импульс электрона вдоль канала;  $\Omega^2 = \omega_0^2 + \omega_c^2$  – гибридная частота;  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $E$  – энергия электрона, находящегося в прямоугольной яме.

Далее рассматривается основное состояние в прямоугольной потенциальной яме.

Волновые функции электронов гамильтониана  $H$  имеют вид

$$\Psi_{np_x s} = \Psi_{np_x} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \Psi_{np_x -s} = \Psi_{np_x} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где  $\Psi_{np_x} = \frac{1}{\sqrt{L_x}} \exp(ip_x x / \hbar) \chi_n \left( \frac{y-y_0}{a_H} \right) \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \left( \frac{\pi z}{a} \right)$ ,

здесь  $a_H = \sqrt{\hbar/m^* \Omega}$ ;  $L_x$  – длина канала;  $\chi_n \left( \frac{y-y_0}{a_H} \right)$  – осцилляторные функции.

### Коэффициент поглощения

Выражение матричного элемента оператора возмущения, соответствующее поглощению фотона и эмиссии фонона с переворотом спина для перехода  $s = 1 \rightarrow s' = -1$ , имеет вид

$$\begin{aligned} & \langle n', p'_x, -1, -\mathbf{f} | F | n, p_x, 1, 0 \rangle = \\ & = \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{2} d \left( \frac{1}{2NM\omega_q \hbar} \right)^{1/2} \left( -\frac{i e \hbar}{m^* a_H} \sqrt{\frac{2\pi \hbar N_f}{\epsilon \omega V}} \right) (N_0 + 1)^{1/2} \rho \times \\ & \times \left\{ \frac{1}{\hbar(\Omega - \omega)} \left[ B_1 \exp(-i\phi) \sqrt{n} R'_{n', n-1} I - B_2 \exp(-i\phi) \sqrt{n+1} R'_{n', n+1} I + B_2 \frac{1}{\rho} R'_{n', n} I + \right. \right. \\ & \quad \left. \left. + A \sqrt{2} \exp(-i\phi) R'_{n', n} I - iM \sqrt{\hbar m^*} T(e_y - ie_x) \exp(-i\phi) R'_{n', n} \right] + \frac{\exp(2i\phi)}{\hbar(\Omega + \omega)} \times \right. \\ & \quad \times \left[ B_1 \exp(-2i\phi) \frac{R'_{n', n}}{\rho} I + B_1 \exp(-i\phi) \sqrt{n} R'_{n', n-1} I - B_2 \exp(-i\phi) \sqrt{n+1} R'_{n', n+1} I + \right. \\ & \quad \left. \left. + A \sqrt{2} \exp(-i\phi) R'_{n', n} I - iM \sqrt{\hbar m^*} T(e_y - ie_x) \exp(-i\phi) R'_{n', n} \right] \right\} \delta \left( \frac{p'_x - p_x}{\hbar}, -q_x \right), \quad (6) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} R'_{n', n} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \chi_{n'}^* \left( \frac{y-y'_0}{a_H} \right) \exp(-iq_y y) \chi_n \left( \frac{y-y_0}{a_H} \right) dy, T = \frac{2\sqrt{2}\pi\sqrt{\hbar}}{a^2 \sqrt{m^*}}, \\ I &= \exp(-i\gamma) \sin(\gamma) \left[ \frac{1}{\gamma} - \frac{\gamma}{(\gamma^2 - \pi^2)} \right], M = \frac{1}{2} \frac{i\pi a}{(\pi^2 - \gamma^2)} \exp(-i\gamma) \sin(\gamma), \gamma = q_z a / 2; \\ A &= ie_z \left( p_x - p_x \frac{\omega_c^2}{\Omega^2} \right) + e_z \frac{\hbar}{\sqrt{2} a_H} \rho \left( \sin \phi - i \frac{\Omega}{\omega_c} \cos \phi \right) - \frac{\hbar q_z}{2} (e_y - ie_x); \\ B_1 &= ie_z \sqrt{\hbar m^*} \left( \sqrt{\Omega} - \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right), B_2 = ie_z \sqrt{\hbar m^*} \left( \sqrt{\Omega} + \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right). \end{aligned}$$

Учитывая, что гибридный импульс пренебрежимо мал по сравнению с тепловым импульсом [9], можно положить  $q_x = 0$ ,  $p_x = 0$  в фигурной скобке формулы (6) и в переменной  $\rho$ . Рассмотрим основные переходы, которые происходят из состояния с  $n = 0$ . Проведя простые, но громоздкие вычисления, можно записать парциальный коэффициент поглощения соответствующий эмиссии фонона и переходу  $s = 1 \rightarrow s' = -1$

$$\frac{\Gamma^+(0, n')}{\Gamma_0} = (N_0 + 1) \sum_e \sigma(0, n') \frac{sh(\hbar\Omega/2T)\Omega^{3/2} \exp(-g\mu_0 H/2T)}{\omega\omega_q^{1/2} \operatorname{ch}(g\mu_0 H/2T)} \times \\ \times \exp\left(\frac{-\hbar\Omega}{2T}\right) \exp\left(\frac{\hbar\Delta\omega_q^+}{2T}\right) K_0\left(\frac{\hbar|\Delta\omega_q^+|}{2T}\right), \quad (7)$$

$K_0(x)$  – функция Макдональда;  $\Gamma_0 = \frac{d^2 n_e e^2 V m^*}{8c\pi\sqrt{\pi T \epsilon \omega_0 N M} \omega^{1/2} \hbar^{5/2} a}$ ,

$\Delta\omega_q^+ = \omega - \omega^+ + g\beta_0 H$  – расстройка резонанса;  $\beta_0 = e/2m_0c$ ,  $\omega^+ = n'\Omega + \omega_q$ .

Здесь  $\sigma(0, n')$  имеет вид

$$\sigma(0, n') = \Omega \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho^2 \left[ \frac{1}{(\Omega - \omega)^2} \left\{ e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 - 2e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 2e_z^2 b_2^2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 - 2e_z^2 b_2^2 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 + q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 + T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \right\} + \frac{2}{(\Omega^2 - \omega^2)} \times \right. \\ \left. \times \left\{ -e_z^2 b_1 b_2 \frac{1}{\rho} Q_{n',0} Q_{n',1} I_1^2 - e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 - 2e_z^2 b_2^2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',0} Q_{n',1} I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + e_z^2 b_1 b_2 \frac{1}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho} Q_{n',0} Q_{n',1} I_1^2 + e_z^2 b_2^2 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 - e_z^2 b_1 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 + 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 - q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 - T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \right\} + \right. \\ \left. + \frac{1}{(\Omega + \omega)^2} \left\{ e_z^2 b_1^2 \frac{1}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 + 2e_z^2 b_1 b_2 \frac{1}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + 2e_z^2 b_1 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 + 2e_z^2 b_2^2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 - 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 + \right. \right. \\ \left. \left. + q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 + T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \right\} \right] d\gamma d\rho, \quad (8)$$

где

$$Q_{n',n} = (-1)^{n'-n} \sqrt{\frac{n!}{n'!}} \rho^{n'-n} L_n^{n'-n}[\rho^2] \exp(-\rho^2/2), \quad b_1 = \left( \sqrt{\Omega} - \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right), \\ b_2 = \left( \sqrt{\Omega} + \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right), \quad I_1 = \exp(i\gamma)I, \quad M_1 = i^{-1} \exp(i\gamma)M, \quad P = \sqrt{\hbar/2m^*}. \quad (9)$$

Учитывая тот факт, что мы рассматриваем взаимодействие электронов с поперечными оптическими фононами, интегралы по  $\gamma$  в формуле (8) легко вычисляются [8].

Коэффициент поглощения, соответствующий эмиссии фонона для перехода  $s = -1 \rightarrow s' = 1$  получается из формулы (7) с заменой  $\exp(-g\mu_0 H/2T)$  на  $\exp(g\mu_0 H/2T)$ ,  $\Delta\omega_q^+ = \omega - \omega^+ - g\beta_0 H$ , форм-фактор  $\sigma(0, n')$  имеет тот же вид (8), но с параметрами  $b_1$  и  $b_2$ :

$$b_1 = \left( \sqrt{\Omega} + \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right); b_2 = \left( \sqrt{\Omega} - \frac{\omega_c}{\sqrt{\Omega}} \right). \quad (10)$$

Коэффициент поглощения, соответствующий переходу  $s = 1 \rightarrow s' = -1$  и абсорбции фонона, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\Gamma^-(0, n')}{\Gamma_0} = N_0 \sum_e \sigma(0, n') \frac{\text{sh}(\hbar\Omega/2T)\Omega^{3/2}}{\omega\omega_q^{1/2}} \frac{\exp(-g\mu_0 H/2T)}{\text{ch}(g\mu_0 H/2T)} \times \\ \times \exp\left(-\frac{\hbar\Omega}{2T}\right) \exp\left(\frac{\hbar\Delta\omega_q^-}{2T}\right) K_0\left(\frac{\hbar|\Delta\omega_q^-|}{2T}\right), \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \sigma(0, n') = \Omega \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \rho^2 \left[ \frac{1}{(\Omega - \omega)^2} \left\{ e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 - 2e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - 2e_z^2 b_2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 + 2e_z^2 b_2 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 + q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 + T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \right\} + \frac{2}{(\Omega^2 - \omega^2)} \times \right. \\ \left. \times \left\{ -e_z^2 b_1 b_2 \frac{1}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 - e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 + 2e_z^2 b_2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + e_z^2 b_1 b_2 \frac{1}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 b_2^2 \frac{1}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 - e_z^2 b_2 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 b_1 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 - \right. \right. \\ \left. \left. - e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 - 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 - q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 - T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \right\} + \right. \\ \left. + \frac{1}{(\Omega + \omega)^2} \left\{ e_z^2 \frac{b_1^2}{\rho^2} Q_{n',0}^2 I_1^2 + e_z^2 \frac{2b_1 b_2}{\rho} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 - 2e_z^2 b_1 \sqrt{\Omega} Q_{n',0}^2 I_1^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + e_z^2 b_2^2 Q_{n',1}^2 I_1^2 - 2e_z^2 b_2 \rho \sqrt{\Omega} Q_{n',1} Q_{n',0} I_1^2 + e_z^2 \rho^2 \Omega Q_{n',0}^2 I_1^2 + \right. \right. \end{aligned}$$

$$+ 2q_z T e_y^2 P Q_{n',0}^2 I_1 M_1 + q_z^2 e_y^2 P^2 Q_{n',0}^2 I_1^2 + T^2 e_y^2 Q_{n',0}^2 M_1^2 \} d\gamma d\rho, \quad (12)$$

здесь  $I_1 = \sin(\gamma) \left[ \frac{1}{\gamma} - \frac{\gamma}{(\gamma^2 - \pi^2)} \right]$ ;  $M_1 = -\frac{1}{2} \frac{\pi a}{(\pi^2 - \gamma^2)} \sin(\gamma)$ ;  $b_1, b_2$  имеют вид

$$(9); \Delta\omega_q^- = \omega - \omega^- + g\beta_0 H.$$

Как видно из (12), интегралы по  $\gamma$  имеют тот же вид, что и в случае эмиссии фонона (8). Коэффициент поглощения для перехода  $s = -1 \rightarrow s' = 1$  с абсорбцией фонона получается из формулы (11) с учетом замены  $\Delta\omega_q^- = \omega - \omega^- - g\beta_0 H$ ,  $\exp(-g\mu_0 H/2T)$  на  $\exp(g\mu_0 H/2T)$ ,  $\sigma(0, n')$  также имеет вид (12),  $b_1$  и  $b_2$  имеют вид (10). Так как  $K_0(x)$  имеет логарифмическую сингулярность при  $x \rightarrow 0$ , то резонансное поглощение возникает, когда расстройка резонанса равна нулю.

На рис. 1 представлен график зависимости коэффициента поглощения от частоты электромагнитного излучения. Показаны асимметричные резонансные кривые, у которых правое крыло более пологое, чем левое. Справа от резонансных точек при  $\hbar\Delta\omega \gg T$  поглощение имеет корневую зависимость от расстройки резонанса, переходя при  $\hbar\Delta\omega \ll T$  в логарифмическую сингулярность; слева от точек резонанса при  $\hbar\Delta\omega \ll T$  сингулярность также логарифмическая, но при  $\hbar\Delta\omega \gg T$  на корневую зависимость накладывается экспоненциальное убывание. Этим и объясняется асимметричный вид резонансных кривых.

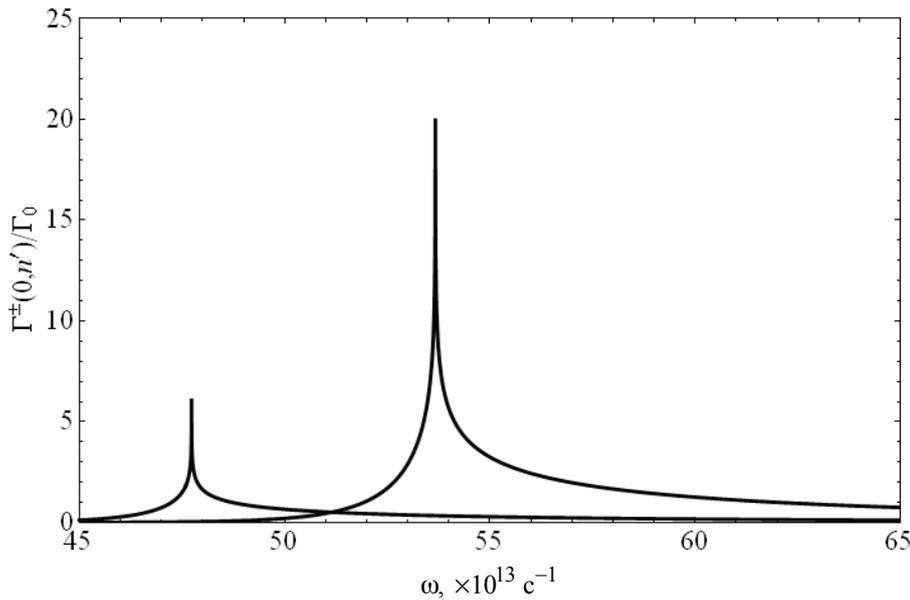


Рис. 1. Зависимость коэффициента поглощения от частоты излучения. Показаны два эмиссионных пика, левый пик соответствует переходу  $s = -1 \rightarrow s' = 1$ , правый —  $s = 1 \rightarrow s' = -1$ ,  $n = 0, n' = 3$ ,  $\omega_0 = 11 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ,  $\omega_q = 9 \cdot 10^{13} \text{ с}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$ ,  $g = 10$

На рис. 2 показана зависимость коэффициента поглощения от магнитного поля. Отметим, что здесь уже левое крыло более пологое, чем правое. Это обусловлено наличием гиперболического синуса и косинуса в (7), которые зависят от магнитного поля.

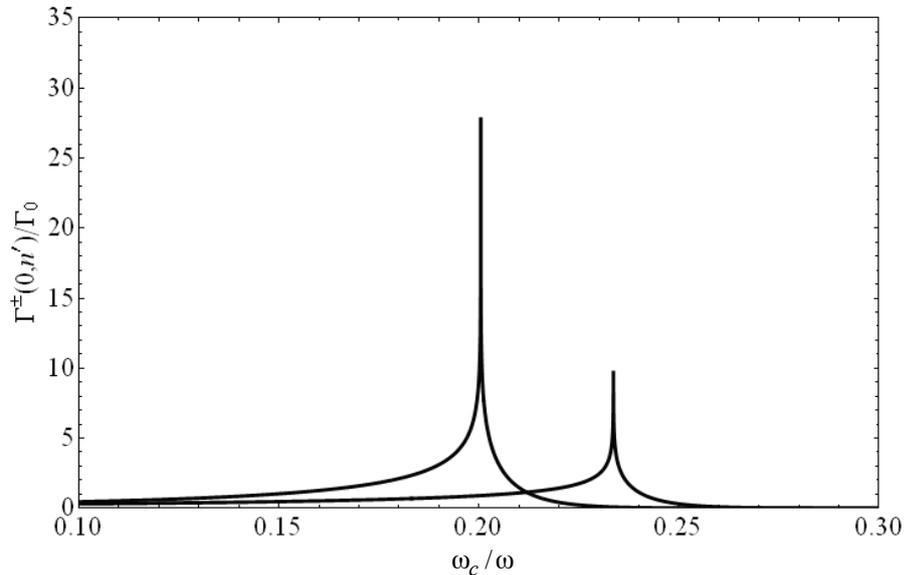


Рис. 2. Зависимость коэффициента поглощения от магнитного поля. Показаны два эмиссионных пика, левый пик соответствует переходу  $s = -1 \rightarrow s' = 1$ , правый –  $s = 1 \rightarrow s' = -1$ ,  $n = 0, n' = 3$ ,  $\omega = 60 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ,  $\omega_0 = 11 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ,  $\omega_q = 9 \cdot 10^{13} \text{ c}^{-1}$ ,  $T = 100 \text{ K}$ ,  $g = 10$

### Заключение

В работе теоретически исследовался вклад в коэффициент поглощения электромагнитного излучения в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем. Канал расположен в постоянном, однородном и поперечном магнитном поле. Рассмотрен невырожденный квазиодномерный электронный газ. Расчет проведен методом теории возмущений и в приближении эффективной массы. Получено выражение коэффициента поглощения, найдены резонансные частоты и форма резонансной кривой. Установлено, что при взаимодействии электронов с поперечными оптическими фононами должно быть резонансное поглощение электромагнитного излучения электронами квантового канала. Отметим также, что резонансы должны наблюдаться на мультигибридных частотах и резонансные электронные переходы происходят между уровнями с разными  $n, n'$ .

Из формул (7), (11), а также графиков видно, что пики спин-гибридно-фононного резонанса в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем окаймляют соответствующие пики гибридно-фононного резонанса в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем [9]. Причем резонансные кривые (рис. 1, 2) имеют тот же асимметричный вид (обусловленный поведением функции Макдональда вблизи точки резонанса), что и в случае резонансных электронных переходов, происходящих без переворота электронного спина [9]. Полуширина резонансной кривой имеет порядок  $\approx \hbar/\tau$ , где  $\tau$  – время релаксации электронов на рассеивателях.

## Список литературы

1. **Матулис, А. Ю.** Спин-циклотронно-фононный резонанс в полупроводниках / А. Ю. Матулис // Физика твердого тела. – 1967. – Т. 9. – С. 2238–2241.
2. **Павлов, С. Т.** Переворачивающее спин-взаимодействие электронов с оптическими фононами в полупроводниках / С. Т. Павлов, Ю. А. Фирсов // Физика твердого тела. – 1965. – Т. 7. – С. 2634–2647.
3. **Маргулис, В. А.** Спин-магнетофононный резонанс в поглощении звука в полупроводниках / В. А. Маргулис // Физика твердого тела. – 1981. – Т. 23. – С. 897–899.
4. **Margulis, V. A.** Hybrid-impurity resonances in anisotropic quantum dots / V. A. Margulis, A. V. Shorokhov // Physica E. – 2009. – Vol. 41. – P. 485–488.
5. **Спирин, К. Е.** Спиновое расщепление в гетероструктурах HgTe/CdHgTe (013) с квантовыми ямами / К. Е. Спирин, А. В. Иконников, А. А. Ластовкин, В. И. Гавриленко, С. А. Дворецкий, Н. Н. Михайлов // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2010. – Т. 92. – С. 65–68.
6. **Васильев, Ю. Б.** Циклотронный резонанс в гетероструктурах с квантовыми ямами InSb/AlInSb / Ю. Б. Васильев, F. Gouider, G. Nachtwei, P. D. Buckle // Физика и техника полупроводников. – 2010. – Т. 44. – С. 1559–1562.
7. **Карпунин, В. В.** Спин-гибридно-фононные резонансы в квантовом канале / В. В. Карпунин, В. А. Маргулис // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2008. – № 3. – С. 82–90.
8. **Прудников, А. П.** Интегралы и ряды. Элементарные функции / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, И. О. Маричев. – М. : Наука, 1981. – 800 с.
9. **Карпунин, В. В.** Гибридно-фононные резонансы в квантовом канале / В. В. Карпунин, В. А. Маргулис // Физика и техника полупроводников. – 2008. – Т. 42. – С. 711–717.

**Карпунин Виталий Владимирович**

старший преподаватель, кафедра физики и методики обучения физике, Мордовский государственный педагогический институт им. М. Е. Евсевьева (г. Саранск)

E-mail: karpuninvv@mail.ru

**Karpunin Vitaly Vladimirovich**

Senior lecturer, sub-department of physics and physics teaching methods, Mordovia State Pedagogical University named after M. E. Evseyev (Saransk)

**Маргулис Виктор Александрович**

доктор физико-математических наук, профессор, кафедра теоретической физики, Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарева (г. Саранск)

E-mail: theorphysics@mrsu.ru

**Margulis Victor Alexandrovich**

Doctor of physical and mathematical sciences, professor, sub-department of theoretical physics, Mordovia State University named after N. P. Ogarev (Saransk)

УДК 538.958

**Карпунин, В. В.**

**Резонансное поглощение электромагнитного излучения в квантовом канале с прямоугольным потенциальным профилем / В. В. Карпунин, В. А. Маргулис // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 111–119.**

## **АНАЛИЗ ДОЛГОВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ АКТИВНОСТИ СОЛНЦА НА ОСНОВЕ РЯДА ЧИСЕЛ ВОЛЬФА (I. Методика)<sup>1</sup>**

*Аннотация.* Представлены результаты исследования эволюции статистических характеристик ряда чисел Вольфа и ряда групп пятен на масштабах их изменчивости порядка 100 лет. Строится полуэмпирическая модель вероятностного распределения чисел Вольфа. Излагается метод моментов в применении к задаче вычисления эволюции параметров распределения чисел Вольфа.

*Ключевые слова:* солнечная активность, числа Вольфа, статистика, эволюция распределения, метод моментов.

*Abstract.* Statistical characteristics of Volf number and number of groups sequence distributions and their evolution in time on scales about 100 years are investigated. The statistical semi-empirical model this distributions are represented. The statistical moment's method in application to a problem of evaluation Volf numbers distribution parameters is discussed.

*Keywords:* solar activity, Volf numbers, statistics, distribution evolution, moments method.

### **Введение**

Задача исследования солнечной активности, кроме важности в выяснении физических механизмов, управляющих динамикой процессов, происходящих на Солнце, имеет большое значение для выяснения и прогноза влияния этой изменчивости на изменения климата на Земле. Такие исследования особенно важны, например, в связи с наблюдаемым сдвигом средней температуры на Земле в сторону ее увеличения, что не находит пока однозначного объяснения. Решение общей задачи предсказания солнечной активности осуществляется в настоящее время множеством различных способов, ориентированных на выделение и анализ различных периодов ее изменчивости. Поскольку одной из наиболее ярко выраженных квазипериодических составляющих изменчивости солнечной активности является 11-летний цикл, то имеется множество работ, связанных с решением задачи предсказания очередного солнечного квази-одиннадцатилетнего цикла на основе информации о предыдущих. Но в изменчивости характеристик самого 11-летнего цикла обнаруживаются как более короткие периодичности (например, 2-летняя составляющая), так и длинно-периодические изменения, которым посвящено также множество работ [1–22] (см. также библиографию там). Цель большинства работ состоит в отыскании прогностических параметров, исследуя эволюцию которых можно с той или иной степенью надежности предсказать изменение солнечной активности в очередном цикле. Большинство проведенных исследований опирается на данные в виде чисел Вольфа и использует различные типы параметров, которые могут быть оценены из самого ряда.

---

<sup>1</sup> Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ, проект 08-01-97013-р\_поволжье\_a.

Это и авторегрессионные модели [11], различные типы индексов, например: индекс, связанный с числом групп пятен [13]; параметр экспоненты Харста [16] и т.д. В значительно меньшей степени в современных работах уделяется внимание исследованию изменчивости непосредственно параметров статистического распределения чисел Вольфа. В работе [23] приведены гистограммы распределения ряда чисел Вольфа, восстановленного по палеоданным для больших периодов времени. Однако на таких больших масштабах времени, как тысячи лет, значения индексов солнечной активности являются малонадежными и подвержены значительному статистическому разбросу. Поэтому такую работу имело бы смысл проводить для данных, которые установлены с достаточной надежностью. В известной монографии [10] исследован целый набор статистических свойств различных характеристик параметров солнечных пятен на Солнце, однако вероятностному распределению чисел Вольфа практически внимания не уделялось. Вместе с тем можно ожидать, что исследование самого вероятностного распределения ряда чисел Вольфа может дать полезную информацию об эволюции солнечной активности. Эти надежды основываются на том, что вероятностные распределения содержат в себе всю детерминированную информацию о случайном процессе.

Вместе с тем при исследовании вероятностного распределения такого случайного процесса, как ряд чисел Вольфа, необходимо отдавать себе отчет, что сам этот процесс не стационарен и параметры распределения могут зависеть от времени. Именно зависимость от времени параметров распределения может дать полезную информацию об изменениях в состоянии термодинамической машины Солнца. Однако для этого необходимо иметь возможность связывать параметры распределения, например, его моменты, с какими-либо параметрами физической модели, описывающей такую изменчивость.

В настоящей работе проводится анализ ряда чисел Вольфа с помощью относительно простой полуэмпирической модели, основанной на гипотезе о существовании двух несовместных механизмов возникновения солнечных пятен. Один из них соответствует некоторому равновесному процессу, а второй интерпретируется как «взрывной». Обоснование такого представления приводится в данной статье. Исследования предпринимаются с целью показать возможность извлекать из такой модели существенную информацию о характеристиках солнечной термодинамической машины как целого. Это позволяет также выявить ряд особенностей в эволюции солнечной активности, которые связаны с глобальными изменениями в функционировании этой машины на больших масштабах времени, значительно превышающей характерный временной масштаб солнечного цикла. В отличие от плавных квазипериодических изменений самих чисел Вольфа, обнаруживаемые изменения статистических характеристик вероятностного распределения имеют отрезки времени, когда параметры меняются очень быстро – практически скачкообразно. Быстро изменяющиеся процессы на Солнце обычно связывают со вспышками, характерный временной масштаб которых оценивается, как правило, минутами или десятками минут. Изменения в статистических характеристиках среднемесячных чисел Вольфа, как кажется, не могут быть связаны со вспышечной активностью. Однако можно предположить, что вспышки типа вспышки 1859 г. могут быть связаны с существенными изменениями термодинамической системы Солнца, поскольку энергия, выбрасываемая в таких

вспышках, уже может быть сравнимой с энергией глобальных процессов на Солнце. В настоящей работе проводится исследование параметров предложенной модели в течение последних 250 лет. Основным набором данных, который используется для анализа изменчивости активности Солнца, выбран ряд ежемесячных чисел Вольфа с 1749 по 2009 г., имеющийся на Интернет-сайте [1]. Вспомогательным набором данных, который позволяет увеличить интервал, на котором можно получить оценки исследуемых параметров, является ряд ежемесячных чисел групп пятен. Этот ряд имеется на том же Интернет-сайте, но, по всей видимости, менее надежен. Однако в силу того, что в работе анализируются не отдельные значения рядов, а их усредненные за 100 лет статистические характеристики, флуктуации оценок оказываются не очень существенными. Задачей этого исследования является выявление скрытых механизмов, управляющих динамикой солнечной активности на больших масштабах времени, и отыскание новых прогностических параметров, позволивших бы сделать предсказания о характере возможных изменений в функционировании солнечной термодинамической системы.

### 1. Скользящие ряды чисел Вольфа

Для выявления изменчивости статистических характеристик ряда чисел Вольфа необходимо иметь множество рядов, сдвинутых во времени, для каждого из которых строится гистограмма распределения. Для этого в данной работе используется метод скользящих рядов. Метод скользящих рядов сводится к сравнительному исследованию свойств рядов чисел Вольфа  $W_a = \{w_{a,i}\}_{i=1}^N$ , полученных из полного ряда  $W = \{W_i\}_{i=1749,1}^{2009,4}$  общей длиной  $N_0 = 3115$  с помощью процедуры выделения части ряда заданной длины  $N$ , начиная с некоторого элемента ряда с номером  $a$ :

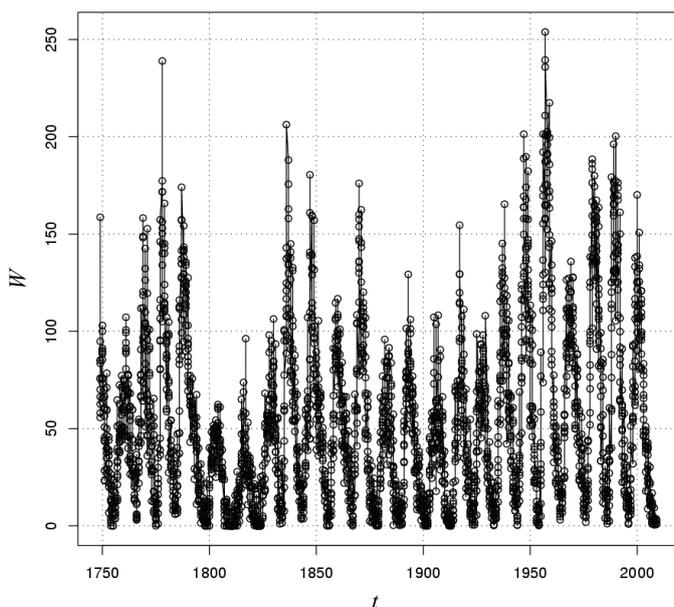
$$w_{a,i} = W_{as+(i-1)}, i = 1, 2, \dots, N.$$

В этом соотношении целое число  $a$  определяет номер каждого ряда в создаваемом многомерном наборе данных:  $a = 0, 1, 2, \dots, M$ . Фактически номер  $a$  связан со временем  $t_a = a\Delta t$  между начальными значениями рядов, которое можно рассматривать в качестве реального параметра, позволяющего упорядочить во времени изменения средних характеристик отдельных рядов  $W_a$ . Целое число  $s$  определяет величину временного сдвига между началами отдельных рядов. Числа  $M, s$  и  $N$  связаны между собой и общей длиной ряда  $N_0$  соотношением  $s = [(N_0 - N)/M]$ ,  $[k]$  – целая часть числа  $k$ . Обозначим через  $\bar{W}_N(a)$  и  $\sigma_N(a)$  среднее значение ряда с номером сдвига  $a$  длиной  $N$ .

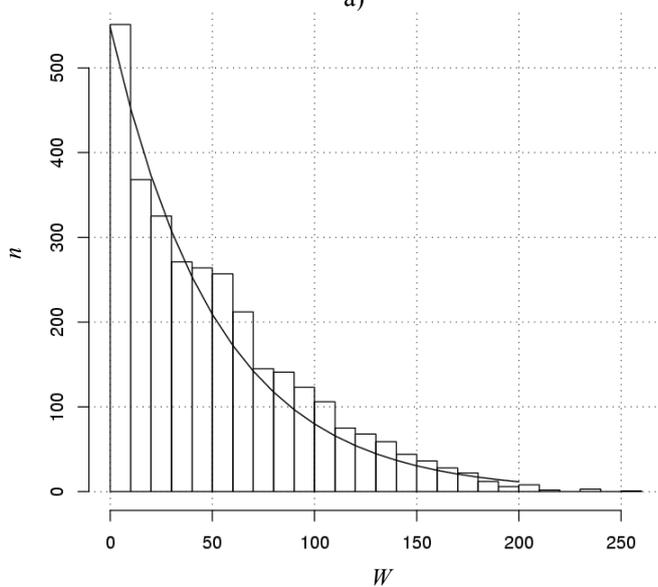
### 2. Распределение вероятностей среднемесячных чисел Вольфа

Гистограмма распределения вероятности появления определенного числа пятен (рассчитанных с помощью формулы Вольфа) в течение месяца, вычисленная по всему ряду (рис. 1), достаточно хорошо описывается показательным распределением следующего вида:

$$\rho_0(n) = \lambda e^{-\lambda n}. \quad (1)$$



а)



б)

Рис. 1. Числа Вольфа: а – ежемесячный ряд; б – гистограмма

Это устанавливается с помощью критерия  $\chi^2$  и, собственно, наглядно подтверждается близостью среднего значения полного набора ежемесячных чисел Вольфа  $\bar{W}$  к стандартному отклонению этого же полного набора  $\sigma$ :  $\bar{W} = 51,9$ ,  $\sigma = 44,3$ . Для теоретического распределения (1) эти величины должны совпадать точно:  $\bar{w}_0(t) = \sigma_0 = \lambda^{-1}$ . Некоторое различие в величинах  $\bar{W}$ ,  $\sigma$  указывает на существование дополнительной составляющей в истинном распределении, которое несколько искажает распределение (1). Длина иссле-

дуемого ряда в целом и отдельных скользящих рядов вполне достаточна для того, чтобы выявить искажения в структуре распределения со временем и установить форму дополнительной составляющей с требуемой для прогноза степенью надежности.

Для учета этого искажения в данной работе предлагается модель в форме смеси двух распределений, одним из которых является (1), а вторым – некоторое распределение, которое можно выбрать, изучая результаты моделирования.

### 3. Особенности эволюции моментов распределения чисел Вольфа

Расчет параметров распределения будет проводиться в данной работе на основе метода моментов. Прежде чем переходить к анализу эволюции распределений чисел Вольфа, рассмотрим особенности в долговременной эволюции самих моментов распределений, на основе которых и строятся оценки параметров распределения  $\rho(n,t)$ . На рис. 2 и 3 представлены графики изменения оценок моментов распределения  $\rho(n,t)$  скользящих рядов. Наиболее заметными изменениями со временем оценок математического ожидания распределения  $\rho(n,t)$  (рис. 2) является монотонный рост этой величины. Если определять момент времени, к которому относится оценка среднего по началу скользящего ряда, то рост среднего значения начинается с середины XIX в. и остается таковым и для последнего скользящего ряда с началом в 1909 г.

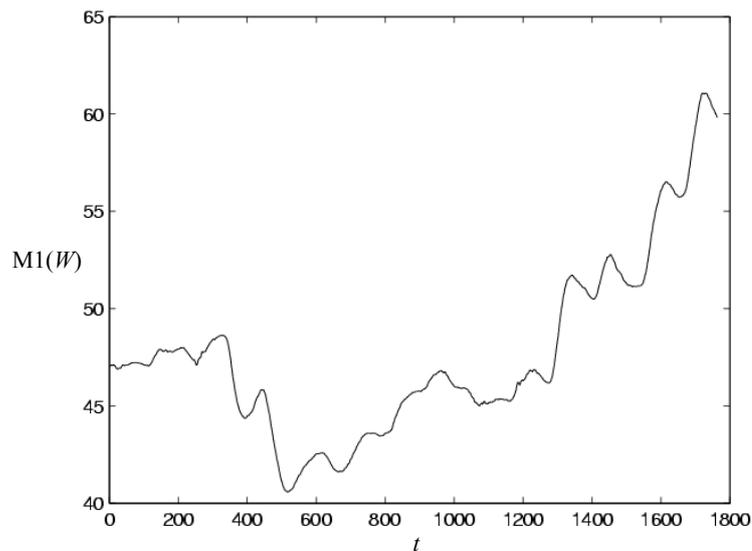


Рис. 2. Эволюция среднего значения скользящих рядов чисел Вольфа.  
По оси абсцисс обозначен номер месяца, начиная с января 1749 г.

Аналогичный, но с некоторого момента более крутой рост наблюдается и во втором моменте (рис. 3,а). Основной вывод, который можно сделать, исходя из наблюдаемого одновременного роста среднего значения чисел Вольфа и второго момента, состоит в том, что со временем возрастает не только вероятность наблюдения все большего числа пятен, но и вероятность флуктуаций этой величины от среднего.

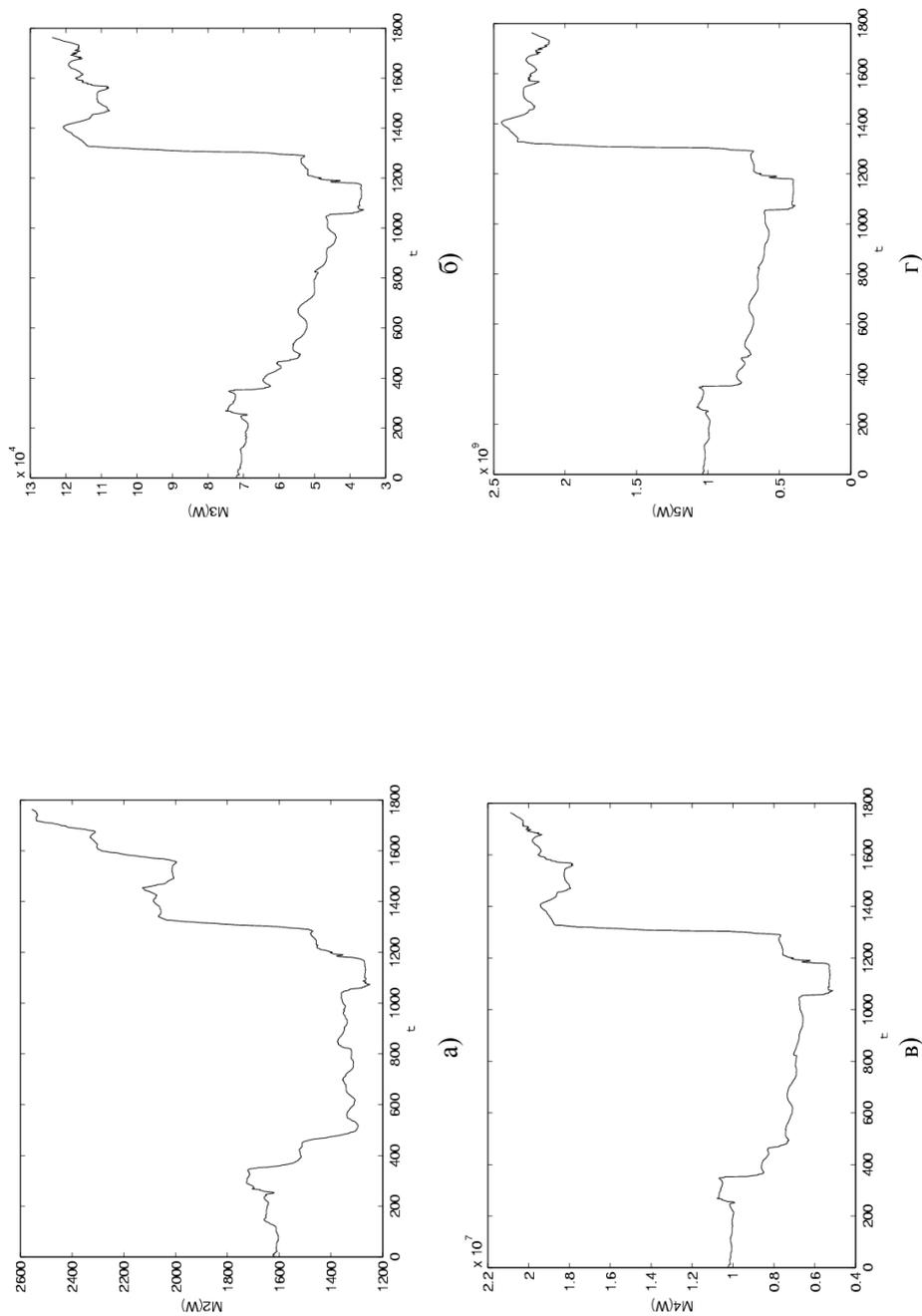


Рис. 3. Эволюция центральных моментов скользящих рядов чисел Вольфа: а –  $m = 2$ ; б –  $m = 3$ ; в –  $m = 4$ ; г –  $m = 5$

Поскольку основной составляющей в распределении  $\rho(n, t)$  является показательное распределение, то это означает, что величина стандартного отклонения, характеризующая среднестатистическое отклонение от среднего, почти равна самому среднему. В свою очередь это означает, что с достаточно большой вероятностью в ежемесячном исчислении могут наблюдаться не только периоды большого числа пятен, но и периоды с числом пятен, практически равным нулю. Это формально объясняет со статистической точки зрения наблюдаемое в начале текущего цикла солнечной активности аномально низкое число пятен, которое в феврале 2010 г. сменилось резким увеличением числа пятен и вспышек. Такое поведение характерно для процесса с показательным распределением.

Эволюция старших моментов представлена на рис. 3. Наиболее существенным элементом в эволюции старших моментов является наличие скачка в XIX в. Этот скачек прослеживается на всех моментах порядка  $k > 1$ .

Поскольку моменты оценивались на интервале времени 100 лет, то абсолютное положение скачка на графиках моментов (рис. 3) установить можно лишь, связав какой-либо известный факт из истории наблюдения солнечной активности с характеристиками эволюции исследуемых параметров. В качестве такого временного маркера можно избрать известную мощную вспышку 1859 г. Эта вспышка хорошо прослеживается по данным химических маркеров (нитратный след [24, 25]) во льду Антарктики и Гренландии. Согласно графикам на рис. 3 наиболее значительный скачок в моментах распределения чисел Вольфа наблюдается спустя почти сто лет от начала ряда, датируемого 1749 г. Скачок в моментах распределений как раз приходится на время вблизи вспышки 1859 г., если в качестве момента, к которому привязываются значения моментов, полученные на отрезках длиной 100 лет, выбрать начало этого отрезка. Сам факт того, что в параметрах распределения изменения происходят, начиная с момента вспышки, указывает на то, что само распределение формируется в результате происходящих изменений на Солнце и является их следствием и индикатором. В результате мы получаем в руки новый тип индексов, характеризующих скачкообразные изменения в состоянии Солнца. Однако сами моменты распределения чисел Вольфа с физической точки зрения мало информативны. Для получения более информативных параметров далее предлагается модель вероятностного распределения чисел Вольфа, на основании которой можно уже строить гипотезы именно о физических механизмах, управляющих вспышками.

#### **4. Модель распределения чисел Вольфа**

Модель распределения, используемая далее, имеет следующий вид:

$$\rho_w(n) = (1 - p(t))\lambda_0(t)e^{-\lambda_0(t)n} + p(t)\rho_1(n, t). \quad (2)$$

Это распределение можно интерпретировать как полную вероятность появления определенного числа пятен под действием двух несовместных механизмов. Вероятность срабатывания одного из этих механизмов (основного) равна  $1 - p(t)$ , а второго  $p(t)$ . Плотность вероятности появления  $w$  чисел Вольфа при срабатывании первого механизма описывается показательным распределением  $\rho_0(w, t) = \lambda_0(t)e^{-\lambda_0(t)w}$ , а второго –  $\rho_1(n, t)$ , функциональ-

ный вид которого еще следует выбрать на основе анализа эмпирического распределения ряда чисел Вольфа.

Показательное распределение  $\rho_0(w, t)$  можно интерпретировать как распределение по энергиям, если при действии этого механизма каждое появившееся пятно имеет некоторое слабо меняющееся среднее значение энергии  $E_0$ . В этом случае показательное распределение есть распределение Больцмана по энергиям. Формально мы можем при такой интерпретации считать, что  $\lambda_0(t) = E_0(t)/kT_*(t)$ , где  $T_*(t)$  – некоторая условная температура системы. Эта интерпретация не является достаточно обоснованной и приводится здесь лишь в качестве иллюстрации возможных типов объяснения этой части распределения.

Как видно из рис. 1,б, наиболее существенные отклонения от показательного распределения наблюдаются в области чисел Вольфа порядка 50–80 и практически исчезают при больших и малых (вблизи нуля) значениях  $w$ . Это означает, что второй механизм срабатывает реже, но порождает сразу множество пятен, число которых находится вблизи значения 50–80, которое должно соответствовать модели распределения  $\rho_1(n, t)$ . В силу этого мы можем предполагать, что такой механизм носит «взрывной» характер, а само распределение  $\rho_1(n, t)$  можно аппроксимировать либо распределением типа максвелловского:

$$\rho_1^{(I)}(n, t; q) = Z_1 n^q e^{-n^2/2\sigma^2(t)}, \quad (3)$$

либо распределением следующего вида:

$$\rho_1^{(II)}(n, t) = Z_1 n^q e^{\lambda_1(t)n}, \quad (4)$$

с параметрами  $q, \lambda_1(t)$  и  $\sigma(t)$ , которые должны вычисляться из экспериментальных данных. К этим параметрам добавляется еще и параметр  $p(t)$ , который наиболее важен с физической точки зрения, поскольку определяет вероятность срабатывания взрывного механизма в солнечной активности. Для оценивания этих параметров воспользуемся методом моментов [26, 27].

## 5. Метод моментов

Метод моментов базируется на вычислении параметров теоретических распределений на основе оценок моментов случайной величины по эмпирическим данным. Распределения  $\rho_0(n, t)$  и  $\rho_1^{(I, II)}(n, t; q)$  содержат по одному параметру ( $q$  считается заданным). Еще один параметр  $p(t)$  принадлежит смеси распределений  $\rho(n, t)$ . Таким образом, для построения распределения  $\rho(n, t)$  требуется вычислить три параметра. Для этого согласно методу моментов достаточно вычислять три момента эмпирического распределения.

Предполагая, что  $\rho_1(n, t)$  нормировано, получаем следующие соотношения для параметров полного распределения:

$$m_1(t) = \bar{w}(t) = (1 - p(t))\bar{w}_0 + p(t)\bar{w}_1; \quad (5)$$

$$m_2(t) = \sigma^2(t) = (1 - p(t))[\sigma_0^2(t) + (\bar{w}(t) - \bar{w}_0(t))^2] + p(t)[\sigma_1^2(t) + (\bar{w}(t) - \bar{w}_1(t))^2]; \quad (6)$$

$$m_3(t) = (1 - p(t))[2\lambda_0^{-3}(t) + (\bar{w}(t) - \bar{w}_0(t))^3] + p(t)[A_1(t) + (\bar{w}(t) - \bar{w}_1(t))^3], \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} \bar{w}_1(t) &= \int_0^{\infty} n \rho_1(n, t) dn, \quad \sigma_1^2(t) = \\ &= \int_0^{\infty} (n - \bar{w}_1(t))^2 \rho_1(n, t) dn, \quad A_1(t) = \int_0^{\infty} (n - \bar{w}_1(t))^3 \rho_1(n, t) dn. \end{aligned}$$

В этих уравнениях в силу того, что распределение  $\rho_0(n, t)$  имеет вид (1),  $\bar{w}_0(t)$  и  $\sigma_0(t)$  выражаются через одну функцию  $\lambda_0(t)$ :

$$\bar{w}_0(t) = \sigma_0(t) = \lambda_0^{-1}(t).$$

Эти уравнения содержат пять неизвестных функций:  $p(t)$ ,  $\lambda_0(t)$ ,  $\bar{w}_1(t)$ ,  $\sigma_1(t)$ ,  $A_1(t)$ . Для случая выбора распределения  $\rho_1(n, t)$  в форме (3) и (4), параметры  $\bar{w}_1(t)$ ,  $\sigma_1(t)$ ,  $A_1(t)$  связаны между собой так, что только один из них оказывается произвольным. Для случая в качестве свободного параметра удобно выбирать  $\lambda_1(t) = n_0^{-1}$ , а в случае (4) – параметр  $n_0(t)$ .

Поскольку в этом случае число параметров оказывается равным 3, то система (5)–(7) из трех уравнений позволяет рассчитать все параметры двух распределений и вероятность взрыва  $p(t)$ . Вычисления проводились для каждого ряда из набора скользящих рядов с шагом в один месяц. При этом численно решалась система из трех алгебраических уравнений суммарного порядка, равного 7. Из корней этого уравнения отбирались корни, удовлетворяющие определенным требованиям.

### **Заключение**

Разработан метод анализа эволюции параметров вероятностного распределения чисел Вольфа с целью выяснения долговременной эволюции солнечной активности. Предлагаемый подход строится на методе моментов [26, 27] в сочетании со специальным выбором смеси распределений, которые наилучшим образом характеризуют форму распределения чисел Вольфа. Важным элементом такого подхода является интерпретация смеси распределений как полной вероятности наблюдения пятен. Это позволяет характеризовать отдельные элементы распределения как вероятности несовместных механизмов образования пятен. Одно из распределений, как вероятность появления пятен в «равновесии», а второе, как неравновесную, или взрывную, составляющую. Метод предназначен для проведения исследований ряда чисел Вольфа, результаты которых изложены в следующей работе.

### **Список литературы**

1. [Электронный ресурс] FTP сервер NASA. – URL: [ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/SOLAR\\_DATA/SUNSPOT\\_NUMBERS/](ftp://ftp.ngdc.noaa.gov/STP/SOLAR_DATA/SUNSPOT_NUMBERS/)
2. [Электронный ресурс] Basu S., Antia H. M. – URL: [http://arxiv.org/articl-id:arXiv:\[astro-ph\] 0001294v1](http://arxiv.org/articl-id:arXiv:[astro-ph] 0001294v1)

3. [Электронный ресурс] Petrovay K. – URL: [http://arxiv.org/articl-id://arXiv:\[astro-ph\]0010096v2](http://arxiv.org/articl-id://arXiv:[astro-ph]0010096v2)
4. [Электронный ресурс] Stefano Sello. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0010106v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0010106v1)
5. **Zieeba, S.** Cover illustration: First Doppler image of a solar-type G dwarf / S. Zieeba, J. Maslowski, A. Michalec, A. Kulak // *Astronomy & Astrophysics*. – 2001. – V. 377. – № 1. – P. 297–311.
6. [Электронный ресурс] Dean-Yi Chou, Alexander Serebryanskiy. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0405175v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0405175v1)
7. **Atac, T.** Flare Index During the Rising Phase of Solar Cycle 23 / T. Atac, A. Ozguc // *Solar Physics*. – 2004. – V. 198. – № 2. – P. 399–407.
8. [Электронный ресурс] R. Cameron and M. SchEussler. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0612693v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0612693v1)
9. [Электронный ресурс] Arnab Rai Choudhuri, Piyali Chatterjee, Jie Jiang. – URL: <http://arxiv.org;articl-id: arXiv:astro-ph/0701527v1>
10. **Витинский, Ю. И.** Статистика пятнообразовательной деятельности Солнца / Ю. И. Витинский, М. Копецкий, Г. В. Куклин. – М. : Наука, 1986. – 294 с.
11. [Электронный ресурс] K. M. Hiremath. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0704.1346v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0704.1346v1)
12. [Электронный ресурс] J. Bushby, Steven M. Tobias. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0704.2345v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0704.2345v1)
13. [Электронный ресурс] A. G. Tlatov. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: //arXiv:\[astro-ph\]0706.1624;arXiv:\[astro-ph\]0703681](http://arxiv.org;articl-id: //arXiv:[astro-ph]0706.1624;arXiv:[astro-ph]0703681)
14. [Электронный ресурс] M. SchEussler. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0712.1917v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0712.1917v1)
15. [Электронный ресурс] R. Cameron, M. SchEussler. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0806.2833v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0806.2833v1)
16. [Электронный ресурс] A. Kilcik1, C.N.K. Anderson, J.P. Rozelot, A. Ozguc. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0811.1708v5](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0811.1708v5)
17. [Электронный ресурс] P.A.Semi. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0903.5009](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0903.5009)
18. [Электронный ресурс] D. Salabert, R. A. Garcia, P. L. Pallre1, S. J. Jimenez-Reyes. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0907.3888v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0907.3888v1)
19. [Электронный ресурс] Leonid V. Didkovsky, Darrell L. Judge, Seth R. Wieman. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0911.0870v1](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0911.0870v1)
20. **Joshi, B.** Periodicities in sunspot activity during solar cycle 23 / Bhuwan Joshi, P. Pant1, P. K. Manoharan // *Astronomy & Astrophysics*. – 2006. – V. 452. – № 2. – P. 647–650.
21. [Электронный ресурс] L. Rogers, Mercedes T. Richards, Donald St. P. Richards. – URL: [http://arxiv.org;articl-id: arXiv:\[astro-ph\]0606426v3](http://arxiv.org;articl-id: arXiv:[astro-ph]0606426v3)
22. **Shea, M. A.** History of Energetic Solar Protons for the Past Three Solar Cycles Including Cycle 22 Update / M. A. Shea, D. F. Smart // *Solar Physics*. – 1990. – June. – V. 127. – P. 297–320.
23. [Электронный ресурс] I. G. Usoskin. A History of Solar Activity over Millennia. – URL: <http://www.livingreviews.org/lrsp-2008-3>
24. **Кочаров, Г. Е.** Естественные архивы солнечной активности и термоядерной истории Солнца за последние миллионы лет / Г. Е. Кочаров // Соросовский образовательный журнал. Физика. – 2000. – № 1. – С. 91–95.
25. **Gisela, A. M.** Dreschhoff, Edward J. Zeller Evidence Of Individual Solar Proton Events in Antarctic Snow / A. M. Gisela // *Solar Physics*. – 1990. – V. 127. – P. 333–346.

26. **Митропольский, А. К.** Техника статистических вычислений / А. К. Митропольский. – М. : Наука, 1971. – 576 с.
27. **Крамер, Г.** Математические методы статистики / Г. Крамер. – М. : Мир, 1975. – 625 с.

---

***Журавлев Виктор Михайлович***

доктор физико-математических наук,  
профессор, кафедра теоретической  
физики, Мордовский государственный  
педагогический институт  
им. М. Е. Евсевьева

E-mail: zhvictorm@mail.ru

***Zhuravlev Viktor Mikhailovich***

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, sub-department  
of theoretical physics, Mordovia  
State Pedagogical University  
named after M. E. Evseyev

***Летуновский Сергей Владимирович***

старший преподаватель, кафедра физики,  
Ульяновский государственный  
университет (филиал в г. Димитровграде)

E-mail: grayser@bk.ru

***Letunovsky Sergey Vladimirovich***

Senior lecturer, sub-department of physics,  
Ulyanovsk State University  
(affiliated branch in Dimitrovgrad)

---

УДК 533.933; 533.932

**Журавлев, В. М.**

**Анализ долговременной эволюции активности солнца на основе ряда чисел Вольфа (I. Методика) / В. М. Журавлев, С. В. Летуновский // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 120–130.**

УДК 535.32

О. А. Голованов, Г. С. Макеева, А. С. Николенко, М. А. Чиркина

## ЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЗОН ПРОПУСКАНИЯ И ЗАПРЕЩЕННЫХ ЗОН В СПЕКТРЕ ОПТИЧЕСКОГО ФИЛЬТРА НА ОСНОВЕ ФОТОННОГО КРИСТАЛЛА

*Аннотация.* Проведено математическое моделирование дифракции электромагнитной волны на 3D фотонно-кристаллической структуре декомпозиционным методом автономных блоков с каналами Флоке. Получены результаты электродинамического расчета коэффициента прохождения оптического излучения через оптический фильтр – 3D фотонно-кристаллическую структуру на основе опаловой матрицы от частоты при различной толщине фотонного кристалла.

*Ключевые слова:* дифракция, коэффициент прохождения, фотонно-кристаллическая структура, опаловая матрица, оптический фильтр.

*Abstract.* The mathematical modeling of diffraction of electromagnetic wave on the 3D photonic crystal structure was done using the decomposition method on autonomous blocks with Floquet channels. The results of electrodynamic calculation of transmission coefficient of optical radiation through the 3D opal-based photonic crystal structure depending on the frequency for different thickness of photonic crystal.

*Keywords:* diffraction, transmission coefficient, photonic crystal structure, opal-based, optical radiation.

### Введение

С 1993 г. в США фирмой «*Мартин Мариетта*» ведется разработка тактического лазерного оружия по программе «*Стингрей*» для вывода из строя оптико-электронных приборов (лазерных дальномеров, приборов ночного видения и т.д.), а также для поражения органов зрения операторов оптических приборов (снайперов, наводчиков орудий и т.д.). Модульное тактическое лазерное оружие предназначено для размещения на башнях танков и БМП (в частности на БМП «*Бредли*»). Масса модуля – 50 кг, мощность излучения  $E_{\text{изл}} = 20 \dots 25$  Дж, длина волны  $\lambda = 1,06$  и  $0,53$  мкм.

Принцип работы активных средств противодействия заключается в воздействии мощных световых вспышек (импульсов), в том числе и лазерного излучения, на органы зрения операторов, наблюдателей, а также на телевизионные камеры, приборы ночного видения инфракрасного диапазона с целью их временной дезориентации или засветки. Дезориентация зрения снайперов, наводчиков под воздействием мерцающих вспышек проявляется в потере восприятия глубины пространства и, как следствие, неточности наведения на цель.

В системе *Advanced Optical Counter-Measures*, предназначенной для подавления оптических систем наведения и целеуказания средств борьбы с воздушными целями, имеются устройства обнаружения вспышек зенитных орудий и два лазерных устройства, которые смонтированы в подвесном контейнере самолета. Один лазер определяет направление и дальность до цели, а другой излучает мощные импульсы на волне  $0,53$  мкм (в зеленой области видимого спектра, т.е. участке спектра наибольшей чувствительности глаза человека) в направлении цели.

Наиболее вероятное поражение зрения операторов оптических систем от лазерного оружия противника представляется возможным на длинах волн  $\lambda = 1,06$  мкм ( $f = 283$  ТГц) и  $\lambda = 0,53$  мкм ( $f = 566$  ТГц). Одно из направлений защиты от тактического лазерного оружия – это использование оптических фильтров частотно-заградительного типа, которые не пропускают (отражают) электромагнитную энергию в узкой полосе частот вблизи частот  $f = 283$  ТГц ( $\lambda = 1,06$  мкм) и  $f = 566$  ТГц ( $\lambda = 0,53$  мкм). Перспективным направлением решения этой задачи является использование в оптических фильтрах фотонных кристаллов на основе опаловой матрицы из наносфер двуокиси кремния  $\text{SiO}_2$  [1].

Технология изготовления фотонных кристаллов на основе опаловой матрицы из наносфер двуокиси кремния  $\text{SiO}_2$  в настоящее время достаточно отработана [1]. Оптические свойства фотонных кристаллов и в том числе положения запрещенной фотонной зоны (полосы непропускания электромагнитной энергии) зависят от периода решетки опаловой матрицы и, следовательно, от размера наносфер  $\text{SiO}_2$ , а глубина запрещенной зоны – от совершенства структуры матрицы [2]. Для того чтобы изготовить оптический фильтр с требуемыми свойствами, необходимо провести математическое моделирование прохождения лазерного излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру на электродинамическом уровне строгости.

### 1. Декомпозиционный вычислительный алгоритм решения задачи дифракции

Рассмотрим дифракцию плоской однородной электромагнитной волны с амплитудой  $c_1^+$  и частотой  $f$  на 3D фотонно-кристаллической структуре в виде плоского диска радиуса  $D$  и толщиной  $d$  (при угле падения излучения  $90^\circ$ ) (рис. 1).

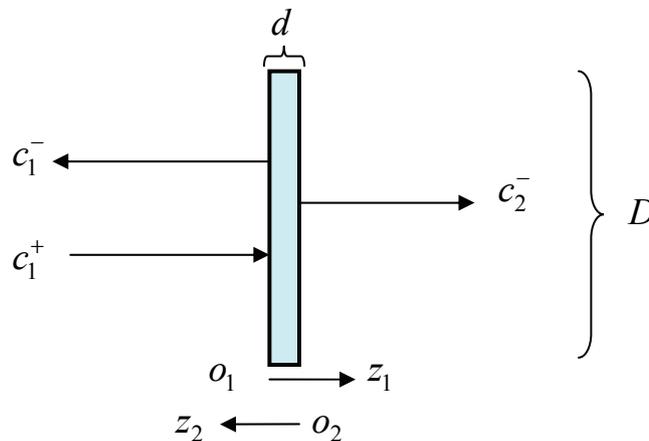


Рис. 1. Дифракция электромагнитной волны на 3D фотонно-кристаллической структуре (при нормальном падении):  $c_1^+$  – амплитуда падающей волны;  $c_1^-$  – амплитуда отраженной волны;  $c_2^-$  – амплитуда прошедшей волны;  $o_1 z_1, o_2 z_2$  – локальные системы координат

В результате дифракции электромагнитной волны на 3D фотонно-кристаллической структуре появляются отраженная волна с амплитудой  $c_1^-$  и прошедшая волна с амплитудой  $c_2^-$ .

Прохождение электромагнитной волны через фотонно-кристаллическую структуру на различных частотах характеризуется коэффициентом прохождения, который определяется

$$k_{\text{пр}} = \frac{|c_2^-|}{|c_1^+|}. \quad (1)$$

Коэффициент прохождения принимает значения от  $k_{\text{пр}} = 0$  (полное отражение от фотонного кристалла – запрещенная фотонная зона) до  $k_{\text{пр}} = 1$  (полное прохождение через фотонный кристалл – зона пропускания).

Математическую модель волнового процесса дифракции электромагнитной волны на 3D фотонно-кристаллической структуре будем строить при помощи декомпозиционного подхода [3]. Область 3D фотонно-кристаллической структуры на основе опаловой матрицы (рис. 1,б) расчлняем условными границами на подобласти – автономные блоки в виде однотипных прямоугольных параллелепипедов (рис. 2) с диэлектрическими наносферами и каналами Флоке на гранях [4].

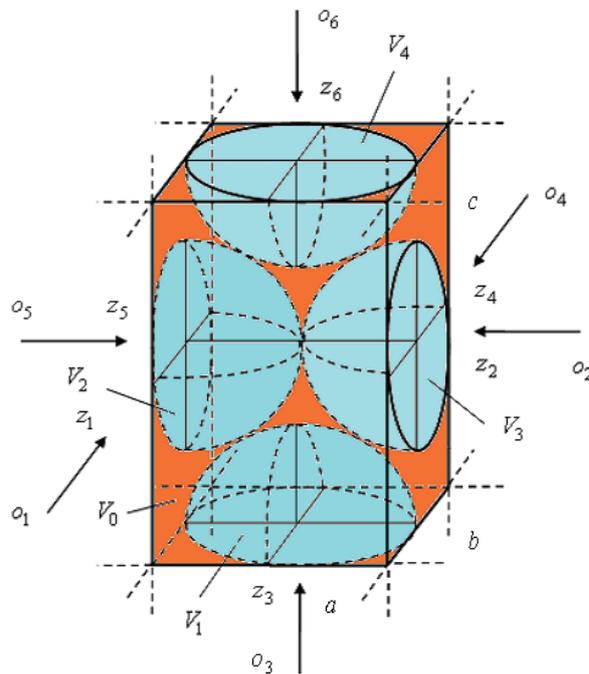


Рис. 2. Автономный блок в виде прямоугольного параллелепипеда с виртуальными каналами Флоке на гранях:  $V_0$  – основная область;  $V = V_1 \cup V_2 \cup V_3 \cup V_4$  – области диэлектрических наносфер;  $V_0 - V$  – межсферическое пространство;  $o_\alpha z_\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, 6$ ) – локальные системы координат для входных сечений  $S_\alpha$  (граней);  $a, b, c$  – геометрические размеры параллелепипеда

Дескриптор (в линейном приближении это матрица рассеяния  $\mathbf{R}$  [5]) автономного блока с каналами Флоке определяем в результате решения краевой задачи дифракции для уравнений Максвелла с электродинамическими граничными условиями.

Краевая задача электродинамики для автономного блока (рис. 2), содержащего диэлектрические наносферы, и с каналами Флоке формулируется следующим образом.

Электромагнитное поле в области  $V$  (диэлектрические наносферы) автономного блока должно удовлетворять уравнениям Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{H} = i \omega \varepsilon_0 \varepsilon_v \vec{E}, \\ \operatorname{rot} \vec{E} = -i \omega \mu_0 \mu_v \vec{H}, \end{cases} \quad (2)$$

где  $\varepsilon_0, \mu_0$  – электрическая и магнитная постоянные;  $\varepsilon_v, \mu_v$  – относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости наносфер.

На гранях автономного блока (входные сечения  $S_\alpha$ ) электромагнитное поле удовлетворяет условиям неасимптотического излучения [6]:

$$\begin{aligned} a_{k(\alpha)} + b_{k(\alpha)} &= \int_{S_\alpha} (\vec{E}_\alpha \times \vec{h}_{k(\alpha)}^*) \cdot d\vec{S}_\alpha + \\ &+ \int_{S_\alpha} (\vec{e}_{k(\alpha)} \times \vec{H}_\alpha^*) \cdot d\vec{S}_\alpha, \quad k = 1, 2, \dots, \alpha = 1, 2, \dots, 6, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\vec{e}_{k(\alpha)}, \vec{h}_{k(\alpha)}$  – электрическая и магнитная составляющие компонентов собственных волн каналов Флоке;  $k$  – номер моды собственной волны;  $\alpha$  – номер грани параллелепипеда;  $a_{k(\alpha)}, b_{k(\alpha)}$  – коэффициенты рядов Фурье

$$\vec{E}_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} a_{k(\alpha)} \vec{e}_{k(\alpha)}, \quad \vec{H}_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} b_{k(\alpha)} \vec{h}_{k(\alpha)} \quad (4)$$

представления электрического и магнитного полей на гранях параллелепипеда.

Для решения этой краевой задачи применим проекционный метод [6]. В качестве базисных функций  $\{\vec{E}_k\}, \{\vec{H}_k\}$  используем системы собственных функций прямоугольного резонатора с однородно-периодическими граничными условиями на гранях резонатора. Собственные частоты  $\omega_k$  и собственные функции  $\{\vec{E}_k\}, \{\vec{H}_k\}$  резонатора определяются из решения следующей краевой задачи для уравнений Максвелла:

$$\left. \begin{aligned} \operatorname{rot} \vec{H}_k &= i \omega_k \varepsilon_0 \varepsilon_v \vec{E}_k; \\ \operatorname{rot} \vec{E}_k &= -i \omega_k \mu_0 \mu_v \vec{H}_k, \end{aligned} \right\} \text{в области } V_0, \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} \vec{E}_k(S_1) &= \vec{E}_k(S_4), \quad \vec{H}_k(S_1) = \vec{H}_k(S_4); \\ \vec{E}_k(S_2) &= \vec{E}_k(S_5), \quad \vec{H}_k(S_2) = \vec{H}_k(S_5); \\ \vec{E}_k(S_3) &= \vec{E}_k(S_6), \quad \vec{H}_k(S_3) = \vec{H}_k(S_6). \end{aligned} \right\} \text{на гранях,}$$

где  $\epsilon_v$ ,  $\mu_v$  – относительная диэлектрическая и магнитная проницаемости среды диэлектрических наносфер. Геометрические размеры прямоугольного резонатора (область  $V_0$ ) совпадают с геометрическими размерами автономного блока (рис. 2).

Применяя метод Галеркина, из проекционной формы и условий неасимптотического излучения (3) получаем матрицу рассеяния автономного блока  $\mathbf{R}$ .

Задачу дифракции на 3D фотонно-кристаллической структуре решаем с помощью декомпозиционного вычислительного алгоритма на основе метода автономных блоков с каналами Флоке [4], модифицированного с целью учета диэлектрическими наносферами.

В декомпозиционной схеме моделирования 3D фотонно-кристаллической структуры все автономные блоки являются однотипными, что позволяет использовать вычислительный алгоритм многоуровневой рекомпозиции блоков (рис. 3), который существенно сокращает время расчетов на компьютере.

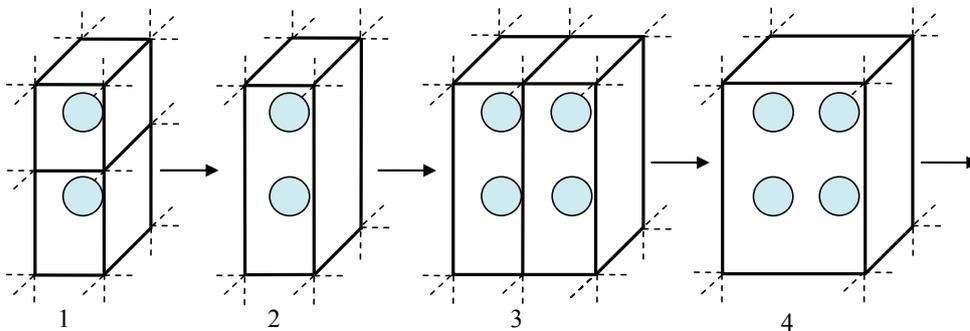


Рис. 3. Многоуровневая рекомпозиция автономных блоков в виде прямоугольных параллелепипедов с диэлектрическими наносферами: 1, 2, 3, 4 – фрагменты рекомпозиции

Многоуровневая рекомпозиция автономных блоков в виде прямоугольных параллелепипедов с диэлектрическими наносферами заключается в следующем. Два однотипных автономных блока объединяются в один блок в виде прямоугольного параллелепипеда (фрагмент 1). Два виртуальных канала Флоке на гранях этого автономного блока преобразуются в один виртуальный канал. В результате преобразования получаем автономный блок с шестью виртуальными каналами на гранях (фрагмент 2), затем процесс повторяется (фрагменты 3, 4 на рис. 3).

## 2. Результаты моделирования прохождения оптического излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру на основе опаловой матрицы

Результаты электродинамического расчета коэффициента прохождения оптического излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру в зависимости от радиуса наносфер  $r$  при различной толщине фотонного кристалла  $d = 2rN$  (различного числа слоев  $N$ ) показаны на рис. 4.

Как следует из результатов математического моделирования, положение запрещенной фотонной зоны зависит от радиуса наносфер  $r$  (периода ре-

шетки опаловой матрицы), и непрохождение лазерного излучения через фотонный кристалл вблизи частоты  $f = 283$  ТГц ( $\lambda = 1,06$  мкм) наблюдается при радиусах наносфер от 128 до 142 нм. Чем больше толщина фотонного кристалла (число слоев  $N$ ), тем меньше коэффициент прохождения, а следовательно, и лучше защита от лазерного излучения. При этом разброс размеров наносфер (радиусов  $r$ ) не должен превышать 5 %.

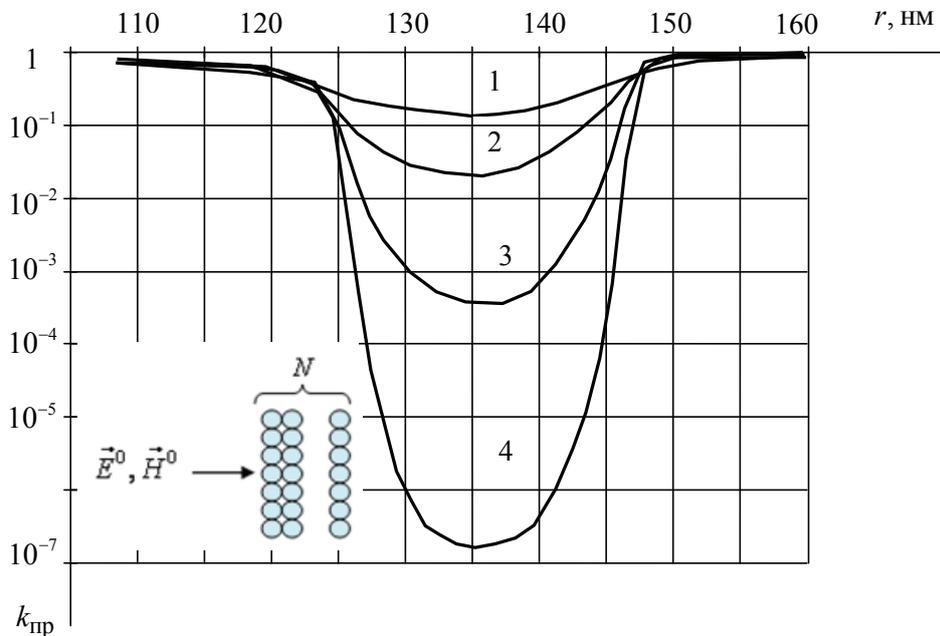


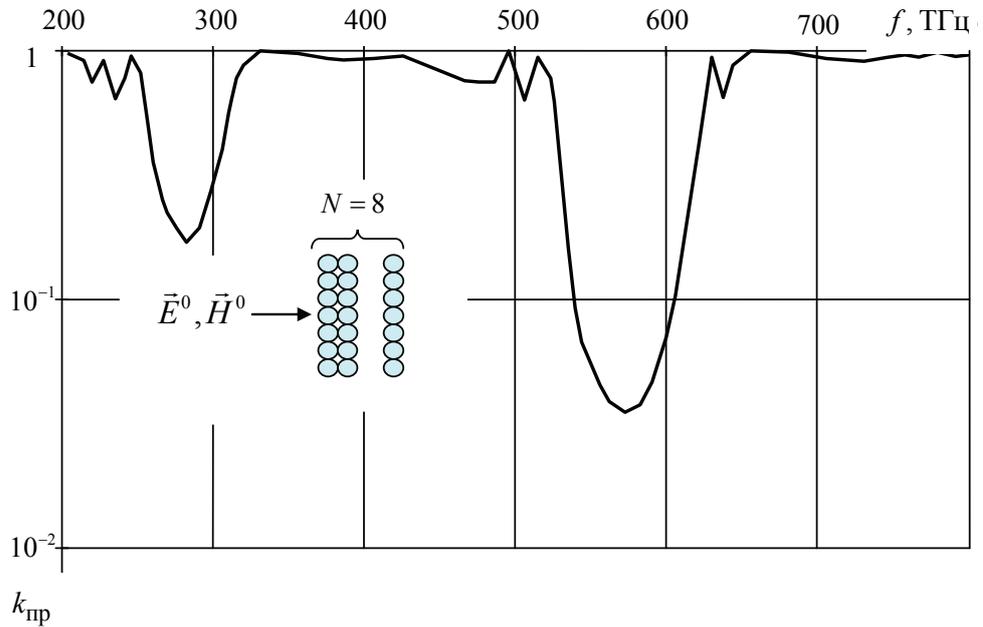
Рис. 4. Коэффициент прохождения оптического излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру в зависимости от радиуса наносфер  $r$  при различной толщине фотонного кристалла  $d = 2rN$ :  $f = 283$  ТГц ( $\lambda = 1,06$  мкм); наносфера  $\text{SiO}_2$  ( $\epsilon_1 = 4,6 - i5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\mu_1 = 1$ ); межсферическое заполнение  $\epsilon_2 = 1$ ,  $\mu_2 = 1$ ;  $D = 10$  мм; кривые 1 –  $N = 8$ ; 2 –  $N = 16$ ; 3 –  $N = 32$ ; 4 –  $N = 64$

Рассчитанные зависимости коэффициента прохождения оптического излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру от частоты при различной толщине фотонного кристалла  $d = 2rN$  (различном числе слоев  $N$ ) показаны на рис. 5.

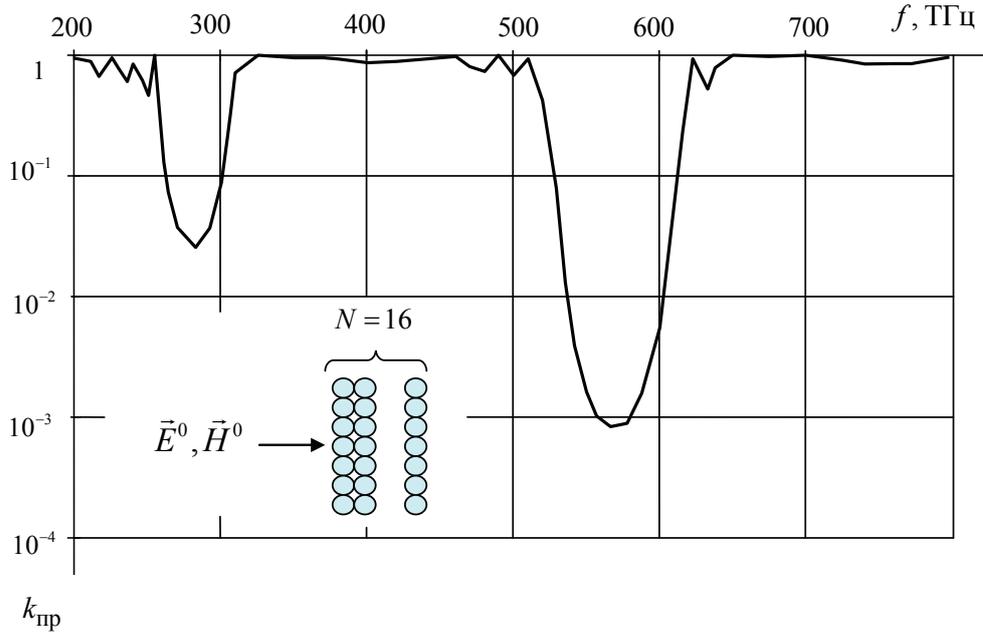
Как следует из результатов электродинамического расчета, приведенных на рис. 5, оптический фильтр на основе фотонного кристалла имеет запрещенные фотонные зоны (полосы непропускания для лазерного излучения) на частотах  $f = 283$  ТГц ( $\lambda = 1,06$  мкм) и  $f = 566$  ТГц ( $\lambda = 0,53$  мкм), в остальной части частотного спектра практически пропускает электромагнитные волны.

Степень защиты от лазерного излучения с помощью оптического фильтра существенно зависит от толщины фотонного кристалла – чем больше толщина, тем надежнее защита. Однако необходимо отметить, что изготовление фотонных кристаллов толщиной  $d = 2rN$  с числом слоев  $N = 64$  и выше сопряжено со значительными технологическими трудностями. Время

изготовления таких кристаллов – несколько недель, при этом структура решеток может иметь значительные дефекты.

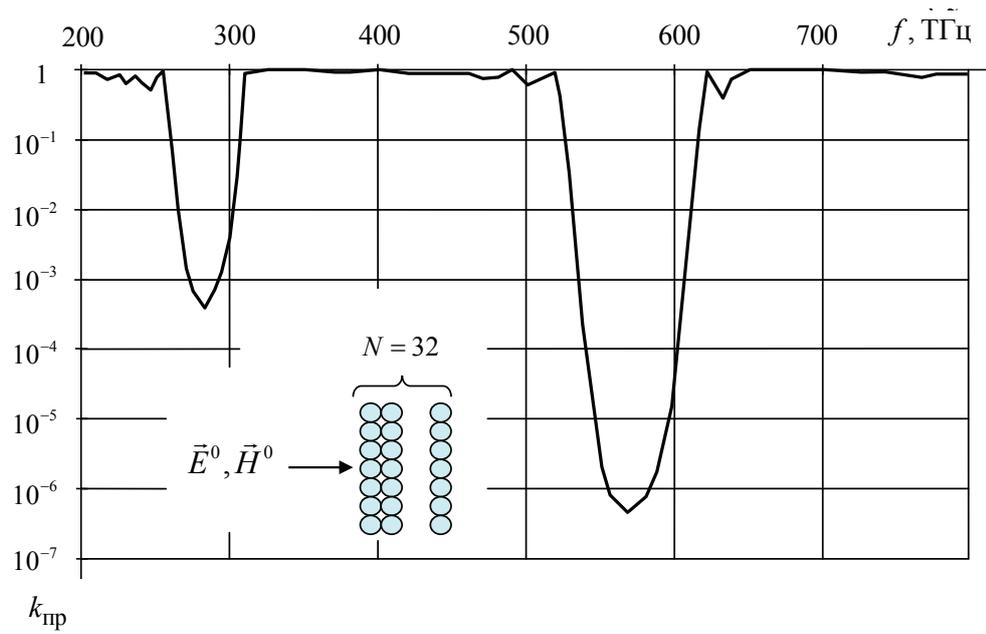


а)  $N=8$

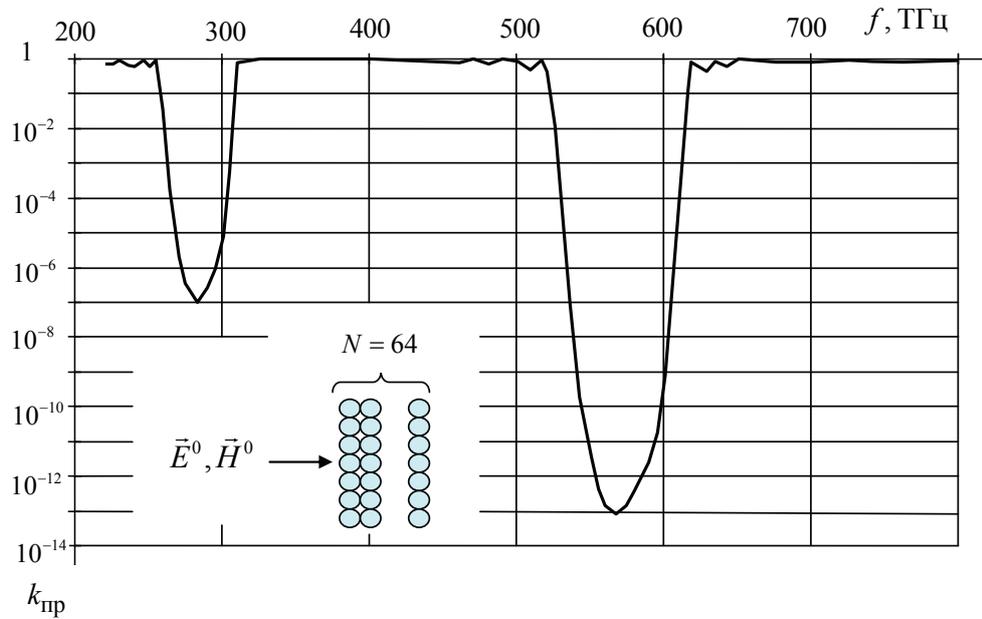


б)  $N=16$

Рис. 5. Спектральные зависимости коэффициента прохождения оптического излучения через 3D фотонно-кристаллическую структуру при различной толщине  $d = 2rN$  фотонного кристалла; наносфера  $\text{SiO}_2$  ( $\epsilon_1 = 4,6 - i5 \cdot 10^{-4}$ ,  $\mu_1 = 1$ ),  $r = 135$  нм; межсферическое заполнение ( $\epsilon_2 = 1$ ,  $\mu_1 = 1$ );  $D = 10$  мм (см. также с. 138)



б)  $N = 32$



г)  $N = 64$

Рис. 5. Окончание

Оптический фильтр на фотонном кристалле на основе опаловой матрицы с гексагональной решеткой из наносфер  $\text{SiO}_2$  диаметром 270 нм (разброс по диаметру не более 5 %) с толщиной  $N = 32$  более надежно защищает зрение операторов оптических приборов от тактического лазерного оружия частот  $f = 283$  ТГц ( $\lambda = 1,06$  мкм) и  $f = 566$  ТГц ( $\lambda = 0,53$  мкм). Поток световой энергии, оцениваемый по зрительному ощущению, от целей снижается

в два раза, при этом оператор практически не видит зеленый цвет и частично желтый. Ведение боевых действий с применением в оптических приборах фотонных кристаллов, очевидно, требует дополнительной подготовки оператора (снайпера, наводчика орудия и т.д.).

### Список литературы

1. **Самойлович, М. И.** Исследование опаловых матриц и нанокompозитов на их основе / М. И. Самойлович, А. Ф. Белянин, С. М. Клещева, В. Д. Житковский, А. В. Гурьянов // Высокие технологии в промышленности России (материалы и устройства функциональной электроники и микрофотоники) : коллективная монография. – М. : ОАО ЦНИТИ «Техномаш», 2004. – Ч. 3. – С. 257–363.
2. **Горелик, В. С.** Оптические и диэлектрические свойства наноструктурированных фотонных кристаллов, заполненных сегнетоэлектриками и металлами / В. С. Горелик // Физика твердого тела. – 2009. – Т. 51. – Вып. 7. – С. 1252–1258.
3. **Никольский, В. В.** Декомпозиционный подход к задачам электродинамики / В. В. Никольский, Т. И. Никольская. – М. : Наука, 1983. – 297 с.
4. **Голованов, О. А.** Автономные блоки с виртуальными каналами Флоке и их применение для решения прикладных задач электродинамики / О. А. Голованов // Радиотехника и электроника. – 2006. – Т. 51. – № 12. – С. 1423–1430.
5. **Голованов, О. А.** Построение дескрипторов нелинейных универсальных автономных блоков с каналами Флоке итерационным методом на основе проекционной модели / О. А. Голованов, Г. С. Макеева, А. А. Туманов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. – 2006. – № 5 (26). – С. 157–166. – (Естественные науки).
6. **Никольский, В. В.** Проекционные методы в электродинамике / В. В. Никольский // Сборник научно-методических статей по прикладной электродинамике. – М. : Высшая школа, 1977. – С. 4–23.

#### **Голованов Олег Александрович**

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математики и начертательной геометрии, Пензенский артиллерийский инженерный институт им. Н. Н. Воронова

E-mail: golovanovol@mail.ru

#### **Golovanov Oleg Alexandrovich**

Doctor of physical and mathematical sciences, professor, head of sub-department of mathematics and descriptive geometry, Penza Artillery Engineering Institute named after N. N. Voronov

#### **Макеева Галина Степановна**

доктор физико-математических наук, профессор, кафедра радиотехники и радиоэлектронных систем, Пензенский государственный университет, действительный член Академии инженерных наук им. А. М. Прохорова

E-mail: radiotech@pnzgu.ru

#### **Makeeva Galina Stepanovna**

Doctor of physical and mathematical sciences, professor, sub-department of radio engineering and radio electronic systems, Penza State University, full member of the Academy of Engineering Sciences named after A. M. Prokhorov

#### **Николенко Антон Станиславович**

преподаватель, Военный учебно-научный центр Сухопутных Войск «Общевойсковая академия ВС РФ» (г. Пенза)

E-mail: nikolants@mail.ru

#### **Nikolenko Anton Stanislavovich**

Lecturer, Combined Arms Academy of the Armed Forces of the Russian Federation (Penza)

**Чиркина Марина Александровна**

старший преподаватель, кафедра  
прикладной математики и информатики,  
Пензенский государственный  
архитектурно-строительный университет

E-mail: chm-77@mail.ru

**Chirkina Marina Alexandrovna**

Senior lecturer, sub-department  
of applied mathematics and informatics,  
Penza State University of architecture  
and construction

---

УДК 535.32

**Голованов, О. А.**

**Электродинамический анализ зон пропускания и запрещенных зон в спектре оптического фильтра на основе фотонного кристалла /**  
О. А. Голованов, Г. С. Макеева, А. С. Николенко, М. А. Чиркина // Известия  
высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические  
науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 131–140.

## ВЗАИМОСВЯЗЬ ЭНЕРГИИ АКТИВАЦИИ ВЯЗКОГО ТЕЧЕНИЯ НЬЮТОНОВСКИХ УГЛЕВОДОРОДНЫХ СРЕД И ИНТЕГРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ИХ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ В ВИДИМОЙ И УФ ОБЛАСТИ

*Аннотация.* Представлено теоретическое обоснование экспериментально обнаруженной функциональной взаимосвязи между спектральными и реологическими свойствами конденсированных диэлектрических сред.

*Ключевые слова:* многокомпонентные углеводородные системы, теория конденсированного состояния, физикохимия диэлектриков, интегральная сила осцилляторов, энергия активации вязкого течения.

*Abstract.* In the multicomponent dielectric hydrocarbon systems, activation energy of viscous flow and integral oscillator strength systems have been defined and investigated. Linear dependences are found between these characteristics. Phenomena are proved theory of the field quantum theory and electrodynamics. The conclusions are confirmed by results of statistical data processing.

*Keywords:* multicomponents hydrocarbon systems, theory of the field, oscillator strength, physicochemical properties, activation energy of viscous flow.

### Введение

В ранее проведенных исследованиях [1–3] предложено определение потенциала ионизации (ПИ) и сродства к электрону (СЭ) [4] по эмпирическим зависимостям, связывающим эти характеристики с интегральным показателем поглощения, являющимся аналогом интегральной силы осцилляторов (ИСО). Получены линейные соотношения для непредельных и ароматических углеводородов. Обнаруженные взаимосвязи актуальны в практических приложениях анализа природных и техногенных конденсированных сред, имеют «прямой выход» в наукоемкие технологии нефтяной и нефтеперерабатывающей отрасли, нефтехимии и органического синтеза, создания композиционных материалов нового поколения. Не меньшую актуальность для технологии углеводородного сырья топливно-энергетического комплекса (ТЭК) представляют физико-механические аспекты транспорта технологических жидкостей в процессе их извлечения, подготовки и переработки. Перемещение углеводородных сред (нефти и нефтепродуктов, полупродуктов нефтехимического синтеза) по технологическим линиям связано с их реологическими свойствами, определение которых затруднено применением до настоящего времени существенно устаревших гидродинамических подходов (механика жидкостей), реализующих механические принципы измерения вязкого течения из уравнений Навье – Стокса. Непосредственными показателями вязких свойств жидкого состояния остаются соотношения приложенного давления и скорости перемещения. Возможность движения жидкостей при заданном давлении (энергия активации вязкого течения) определена «напряжением сдвига», предложенным еще И. Ньютоном. Феноменологический формализм такого подхода затрудняет создание новых направлений в реологии, связанных с физикохимией молекулярных систем, основа исследования которых

представлена анализом электронных спектров поглощения. В свою очередь, информационная среда спектральных методов непосредственно представлена электромагнитным полем ИСО, связь которого с механикой сплошной среды определена физикохимией вещества.

В настоящей работе приведены впервые экспериментально установленные зависимости между вязкостью углеводородных сред и интегральной силой осцилляторов их молекулярных систем. Обнаруженные взаимосвязи требуют теоретического объяснения с учетом дальнейшей возможной унификации применения электронной спектроскопии в реологии и смежных прикладных направлениях исследований. В работе представлен электродинамический подход к теории связи спектров поглощения с механикой жидкости.

Цель исследования состоит в теоретическом обосновании экспериментально установленных соотношений спектральных и реологических свойств изученных углеводородных сред (линейной зависимости энергии активации вязкого течения и интегральной силы осцилляторов составляющего их вещества).

### **Экспериментальная часть, результаты и обсуждение**

Энергия активации вязкого течения вычислена по «приведенной» формуле Аррениуса в интервалах температур  $T_1$  и  $T_2$  (473–573 К) ( $\eta_1$ ,  $\eta_2$  – коэффициенты вязкости,  $R$  – газовая постоянная):

$$E_a = R \frac{T_2 T_1}{T_2 - T_1} \ln \frac{\eta_2}{\eta_1}. \quad (1)$$

Коэффициенты вязкости получены из данных ротационной вискозиметрии стандартным измерением момента силы трения при приложении внешнего момента пробного тела (цилиндра ротационного вискозиметра Куэтта).

Спектральными методами в сочетании с реологическими измерениями «напряжения сдвига» (ротационная вискозиметрия) надежно установлена практически линейная зависимость между энергией активации вязкого течения ( $E_a$ ) и интегральной силой осциллятора углеводородсодержащих многокомпонентных сред природного и техногенного происхождения (коэффициенты корреляции 0,87–0,94). Возрастание  $E_a$  однозначно сопровождается ростом ИСО, причем интервалы границ обнаруженной зависимости могут быть математически «сшиты» без ущерба для целостности общей картины перекрывания «областей существования» значений этих величин, измерение которых осуществлено отдельно. На рис. 1, 2 приведены полученные результаты в виде корреляционных соотношений рядов данных для исследованных объектов, анализ которых актуален в повседневной практике научной и заводской лабораторий.

Таким образом, не вызывает сомнения практическая направленность выявленных зависимостей. Так, более подвижная жидкость характеризуется меньшей энергией активации течения, однозначно связанной с меньшим значением ИСО. Технологичность электронной спектроскопии в сравнении с ротационной вискозиметрией также несомненна. Спектроскопические методы определения вязких свойств жидкостей полностью совместимы с базовыми информационными технологиями (программы компьютерной обработ-

ки спектров и прямая аппаратная связь спектрометров с ЭВМ) и могут быть использованы в непрерывном потоке технологической среды.

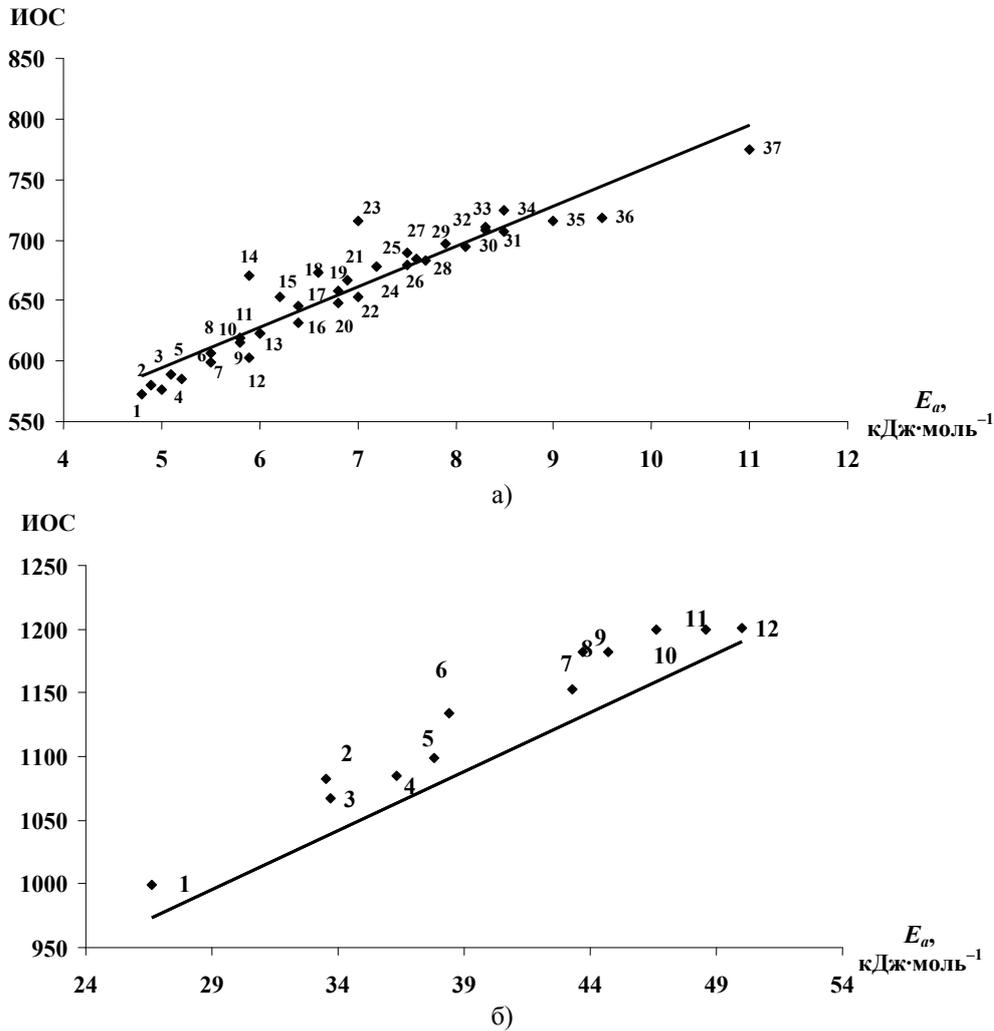


Рис. 1. Зависимости энергии активации вязкого течения и интегральной силы осциллятора углеводородных сред: а – поверхностные нефти различных месторождений Западной Сибири (35 образцов); б – нефтяные битумы различного происхождения (13 образцов)

Полученные экспериментальные результаты обобщены в теоретической части работы.

### Теоретическая часть

Теория связи реологии и спектроскопии углеводородных конденсированных сред, представленная ниже, имеет в своей основе электродинамику сплошных сред.

Следует физически обосновать проявление линейной зависимости энергии активации вязкого течения и интегральной силы осцилляторов углеводородных жидкостей из положений теории диэлектриков. Применительно

к вязким свойствам жидких ньютоновских диэлектрических систем в настоящей работе теория рассмотрена впервые. Необходимой основой такого рассмотрения является реальность взаимодействия компонентов сложной системы жидкого диэлектрика через макроскопическое стационарное электрическое поле  $E$ , создаваемое распределенным зарядом  $q$  в объеме  $V$  конденсированной среды ( $\rho$  – плотность заряда) [5]:

$$q = \int \rho dV . \quad (2)$$

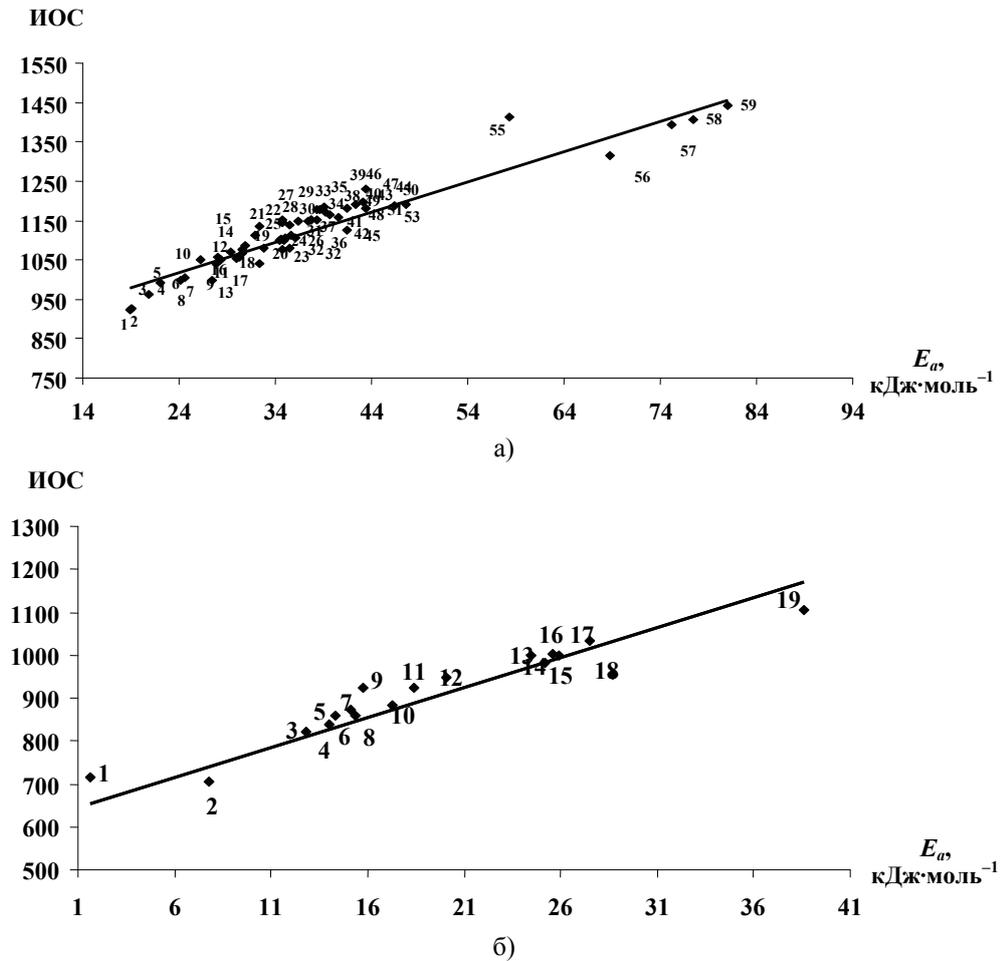


Рис. 2. Зависимости энергии активации вязкого течения и интегральной силы осциллятора углеводородных сред: а – сульфированные высококипящие фракции переработки нефти (59 образцов); б – мазуты и гудроны различных нефтеперерабатывающих заводов (19 образцов)

Наличие такого заряда влечет за собой целый ряд специфических «электрических свойств» вещества, описание которых составляет предмет электродинамики сплошных сред [6]. Заряд определяет поток электрического поля через поверхность  $f$  данного объема и, следовательно, динамические свойства среды:

$$\oint \mathbf{E} d\mathbf{f} = 4\pi \int \rho dV . \quad (3)$$

Правая часть представляет так называемый объемный интеграл заряда, «математические свойства» которого определяют динамику среды согласно теореме Стокса о роторе вектора [7]. Непосредственно из выражения для ротора следует «силовое поле» сплошной среды.

«Динамика» среды исходит из механических представлений силового поля, формализм которого, «совершенно неожиданно», наполнен реальным содержанием. Электрическое поле и есть связующее звено эффектов как вязкого течения, так и интегральной силы осциллятора, а также проявления практически всех макроскопических свойств вещества, «усреднение» которых определено его физикохимией.

«Механика поля» определяет эффекты порождения и передачи давления в среде, что регистрируют и «спектральным интегралом», и вискозиметром. Как известно, вискозиметр измеряет касательную составляющую объемно ориентированного тензора давления, что находит свое отражение в измеряемом механическом моменте [8]. Давлением света может быть объяснена и сущность «спектрального интеграла». Наличие такого давления «одинаково успешно» истолковывают как электромагнитная, так и квантовая теории. В обоих случаях происходит сообщение макроскопической системе (среде) импульса; согласно статистической механике это и есть давление.

Таким образом, и ИСО, и энергия активации вязкого течения имеют формально единое происхождение – механическое противодействие среды, подвергнутой внешнему механическому давлению – «световому» (спекроскопия), или «сдвиговому» (вискозиметр). Сложнее определить *причину* противодействия. Она состоит в наличии электрического поля  $E$  объемного заряда жидкости, которое может быть обнаружено и измерено в механической системе вискозиметра сопряженной измерительной цепью. Теория такого вискозиметра исходит из соотношений уравнений гидродинамики и макроскопической электродинамики, конечный результат которых приводит к «скалярному выражению» для связи моментов ( $\eta$  – вязкость,  $u$  – линейная скорость,  $d$  – расстояние (зазор) между цилиндрами с аксиальным поворотом на угол  $\theta$ ):

$$4\pi\eta \frac{u}{d} = E^2 \sin \theta . \quad (4)$$

При этом реальной инструментальной величиной служит разность потенциалов между «рабочими элементами» вискозиметра – «потенциал» вращающегося цилиндра. Продольно ориентированная его компонента измерима и имеет линейную связь с коэффициентом динамической вязкости. Полученный результат следует непосредственно из известных соотношений для скалярного и векторного потенциалов электромагнитного поля ( $r$  – расстояния до точки наблюдения,  $\rho$  – плотность заряда,  $\mathbf{v}$  – его скорость,  $\mathbf{j}$  – плотность тока):

$$\varphi = \int \frac{\rho dV}{r} + \frac{1}{2c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \int r \rho dV ; \quad (5)$$

$$\mathbf{A} = \frac{1}{c} \int \frac{\rho \mathbf{v}}{r} dV ; \quad \mathbf{j} = \rho \mathbf{v} . \quad (6)$$

В формуле (5) при равномерном движении второй интеграл равен нулю (ускорение отсутствует), а (6) мало (скорость  $v$  мала по сравнению с  $c$  – электромагнитной постоянной).

Обе части «равенства» (4) имеют размерность давления, а само оно имеет смысл закона сохранения энергии. Квадрат напряженности электрического поля объемных зарядов среды и составляет ту часть энергии интегральной силы осциллятора, которая может быть накоплена в среде без диссипации. За вычетом тепловых потерь вся кинетическая энергия, характеризующая ИСО, переходит в потенциальную энергию макроскопического поля. Практически это означает идентичность спектрального интеграла интегралу поля объемных зарядов.

В теоретическом обосновании представлен подход электродинамики сплошных сред, молекулярное строение которых не рассматривается. Использовано представление об «объемно распределенном заряде», плотность которого создает стационарное электрическое поле, реально существующее в форме дипольного момента единицы объема диэлектрической среды. Изменение его определяет как вязко-упругие свойства вещества диэлектрика, так и его спектральные свойства. Такой подход позволяет свести межмолекулярные электромагнитные взаимодействия к макроскопическому электрическому полю внутри диэлектрического тела, изменяющемуся в процессе поляризации.

Поляризация единицы объема вещества состоит в смещении зарядов, входящих в его структуру. Одновременно происходит изменение расстояния между зарядами, что эквивалентно изменению полного дипольного момента объема тела. Именно поэтому поляризация и полный дипольный момент суть одно и то же. Независимо от происхождения поляризации (внешнее давление, напряжение сдвига, внешнее электрическое поле, в том числе световой волны), свободная энергия поляризованного диэлектрика есть одновременно и энергия активации вязкого течения (сдвиговой деформации жидкого тела). Далее следует вывод ее из наиболее общих соображений. Окончательные выражения, которые будут получены, содержат только значения поля внутри диэлектрика и потому не зависят от происхождения поля [6].

При вискозиметрическом определении динамической вязкости механическое воздействие (давление) со стороны «пробного тела» на систему зарядов (диэлектрическое тело) аналогично воздействию внешнего поля напряженностью  $\mathbf{E}$ . Его «появление» приводит к изменению поля в диэлектрике  $\mathbf{E}_0$ .

Согласно известному выражению статистической физики гамильтониан системы частиц от свободной энергии равен

$$\frac{\partial \hat{H}}{\partial \lambda} = \left( \frac{\partial G}{\partial \lambda} \right)_T. \quad (7)$$

Лямбда означает какой-либо параметр, внешний по отношению к системе (давление, плотность массы, заряда, напряженность поля и т.д.). Тогда полный электрический момент тела

$$\mathbf{P} = \left( \frac{\partial G}{\partial \mathbf{E}} \right). \quad (8)$$

При условии однородности поля и линейной связи  $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}$  ( $\mathbf{D}$  – электрическая индукция,  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость), свободная энергия вычисляется не как вариация «механической работы» и энергии поля, а может быть представлена в явном виде [6]:

$$\Delta G = G - G_0(V, T) = \int \frac{\mathbf{E}\mathbf{D} - E^2}{8\pi} dV; \quad (9)$$

$$\Delta G = G - G_0(V, T) = -\frac{1}{2} \int \mathbf{E}\mathbf{P} dV; \quad (10)$$

в однородном электрическом поле в объеме диэлектрика:

$$\Delta G = -\frac{1}{2} \mathbf{E}\mathbf{P}. \quad (11)$$

Итак, энергия активации вязкого течения (сдвиговой деформации) жидкого диэлектрика равна изменению свободной энергии единицы объема всего поляризованного диэлектрического тела.

Связь этой энергии с «интегральной силой осцилляторов» вещества диэлектрика при поглощении им электромагнитного излучения можно определить следующим образом.

Со стороны падающей электромагнитной волны на объем диэлектрика воздействует сила

$$\mathbf{F} = \int (\mathbf{P}\nabla) \mathbf{E} dV; \quad (12)$$

в однородном поле волны

$$\mathbf{F} = \left( \int \mathbf{P} dV \right) \mathbf{E} = (\mathbf{P}\nabla) \mathbf{E}, \quad (13)$$

и с учетом  $\mathbf{P} = \sum q\mathbf{r}$  на «дипольный заряд» действует переменная сила  $\mathbf{F} = q\mathbf{E} = q\mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$  ( $\omega$  – частота падающей волны).

Тогда  $\mathbf{P} = -\frac{q^2}{m\omega^2} N\mathbf{E}$  [6]. Подстановка его в векторное выражение для  $\Delta G$  дает

$$\Delta G = -\frac{1}{2} \mathbf{E}\mathbf{P} = -\frac{\epsilon - 1}{8\pi} E^2 = -\frac{q^2}{2m\omega^2} NE^2. \quad (14)$$

Согласно «правилу сумм» [6] число носителей заряда соответствует интегральной силе осцилляторов  $\int_0^\infty f(\omega) d\omega = N$  (сила осциллятора –  $f(\omega) d\omega$ ).

Как однозначно определено «неквантовой» теорией, дисперсия представлена как  $\epsilon(\omega) = 1 - 4\pi N \frac{q^2}{m\omega^2}$ .

Таким образом, следует ожидать линейную зависимость между энергией активации вязкого течения и интегральной силой осцилляторов электромагнитного спектра диэлектрических сред:

$$E_a = -\frac{q^2 E^2}{2m\omega^2} \int_0^{\infty} f(\omega) d\omega; \quad (15)$$

$$E_a = -Q \int_0^{\infty} f(\omega) d\omega. \quad (16)$$

Как показано в экспериментальной части настоящей работы, линейная зависимость между энергией активации вязкого течения диэлектрических сред и интегральной силой осциллятора, составляющего эту среду материального вещества определена однозначно. Теоретический вывод подтверждает экспериментально установленные соотношения.

### **Заключение**

В настоящей работе впервые приведены экспериментально установленные зависимости спектральных и вязких свойств углеводородных жидкостей-диэлектриков. Актуальность результатов связана с механикой жидкого состояния, гидродинамика и реология которого определена его физикохимией. Физико-химические взаимосвязи молекулярных систем диэлектриков представлены электродинамическими макроскопическими величинами, определяющими вязкоупругие механические соотношения феноменологии сплошных сред. Непосредственно обнаруженная линейная зависимость вязкости (энергии активации вязкого течения) и интегральной силы осцилляторов жидких углеводородов не установленного состава реализована полем объемно распределенного в веществе диэлектрика полного дипольного момента (вектор электрического момента, вектор поляризации).

В практическом аспекте выявленные взаимосвязи дают возможность использования спектральных методов в реологии при анализе механических свойств широкого класса жидких диэлектриков.

### **Список литературы**

1. **Доломатов, М. Ю.** Способ определения потенциалов ионизации и средства к электрону молекул ароматических соединений / М. Ю. Доломатов, Г. Р. Мукаева // Журнал прикладной спектроскопии. – 1990. – Т. 53. – № 6. – С. 950–953.
2. **Доломатов, М. Ю.** Способ определения потенциалов ионизации и средства к электрону атомов и молекул методом электронной спектроскопии / М. Ю. Доломатов, Г. Р. Мукаева // Журнал прикладной спектроскопии. – 1992. – Т. 56. – № 4. – С. 570–574.
3. **Доломатов, М. Ю.** Некоторые физико-химические аспекты прогнозирования свойств многокомпонентных систем в условиях экстремальных воздействий / М. Ю. Доломатов // Журнал Всесоюзного химического общества им. Д. И. Менделеева. – 1990. – Т. 36. – № 5. – С. 632–639.
4. **Гурвич, Л. В.** Энергии разрыва химических связей. Потенциалы ионизации и средство к электрону / Л. В. Гурвич, Г. В. Карачевцев, В. Н. Кондратьев и др. – М. : Наука, 1974. – 351 с.

5. **Ландау, Л. Д.** Теория поля / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 2004. – 512 с.
6. **Ландау, Л. Д.** Электродинамика сплошных сред / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 2005. – 632 с.
7. **Тамм, И. Е.** Основы теории электричества / И. Е. Тамм. – М. : Наука, 1966. – 624 с.
8. **Ландау, Л. Д.** Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 2003. – 632 с.

---

***Доломатов Михаил Юрьевич***

доктор химических наук, профессор,  
заведующий кафедрой математики  
и информатики, Башкирский институт  
социальных технологий Академии труда  
и социальных отношений (Уфа)

E-mail: ivi9090@mail.ru

***Dolomatov Mikhail Yuryevich***

Doctor of chemical sciences, professor,  
head of sub-department of mathematics  
and informatics, Bashkiria institute of social  
technologies of the Academy of labour  
and social relations (Ufa)

***Леонов Вадим Владимирович***

кандидат биологических наук,  
заведующий сектором  
электрохимических исследований  
лаборатории физико-химической  
механики, Институт механики  
Уфимского научного центра Российской  
академии наук

E-mail: ivi9090@mail.ru

***Leonov Vadim Vladimirovich***

Candidate of biological sciences, head  
of electrochemical research sector  
of the laboratory of physical and chemical  
mechanics, Institute of mechanics of Ufa  
research center of the Russian Academy  
of Sciences

---

УДК 537.8

**Доломатов, М. Ю.**

**Взаимосвязь энергии активации вязкого течения ньютоновских углеводородных сред и интегральных характеристик их электронных спектров поглощения в видимой и УФ области / М. Ю. Доломатов, В. В. Леонов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 141–149.**

## ВЛИЯНИЕ СПИНОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА СПЕКТРЫ ПРИМЕСНОГО МАГНИТООПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ В КВАЗИНУЛЬМЕРНОЙ СТРУКТУРЕ

*Аннотация.* В рамках модели потенциала нулевого радиуса в приближении эффективной массы проведено исследование эффекта магнитного вымораживания  $D^{(-)}$ -состояний в КТ с параболическим потенциалом конфинемента. Показано, что энергия связи  $D^{(-)}$ -состояния существенно зависит от направления спина локализованного электрона относительно внешнего магнитного поля. В дипольном приближении получено аналитическое выражение для коэффициента примесного магнитооптического поглощения в квазинульмерной структуре с  $D^{(-)}$ -центрами. Показано, что учет спиновых состояний приводит к появлению на спектральной кривой дополнительных пиков, связанных с параллельной и антипараллельной ориентацией спина электрона относительно внешнего магнитного поля.

*Ключевые слова:* квантовая точка, эффект магнитного вымораживания примеси, спиновые состояния локализованного электрона, аномальный квантово-размерный эффект Зеемана.

*Abstract.* In the framework of zero-range potential in the effective mass approximation study the effect of magnetic freeze-out  $D^{(-)}$ -states in a quantum dot with parabolic confinement potential. The energy of  $D^{(-)}$ -states depends on the spin direction of the localized electron in the external magnetic field. In the dipole approximation, an analytical expression for the magneto-impurity absorption kvazinulmernoy structure with  $D^{(-)}$ -centers. It is shown that the inclusion of spin states leads to the spectral curve of additional peaks associated with parallel and antiparallel orientation of the electron spin relative to the external magnetic field.

*Keywords:* quantum dot, the effect of magnetic impurity freeze-out, spin states of localized electron, anomalous quantum confinement effect of the Zeeman.

### Введение

В последние годы очевиден рост интереса к физическим свойствам массива квантовых точек, которые находят все более широкое применение в различных устройствах оптоэлектроники. Физические характеристики таких систем чрезвычайно чувствительны к наличию единичных дефектов, способных существенно изменять их оптические свойства и приводить к появлению новых эффектов, связанных с модификацией примесных состояний в условиях размерного и магнитного квантования.

Цель настоящей работы состоит в выявлении эффектов магнитного поля, связанных с наличием спиновых состояний локализованных электронов, в спектрах примесного поглощения в квазинульмерной структуре с  $D^{(-)}$ -центрами.

#### 1. Энергетический спектр комплекса «квантовая точка – $D^{(-)}$ -центр» в квантующем магнитном поле с учетом спина локализованного электрона

Рассматривается полупроводниковая сферическая квантовая точка (КТ) радиусом  $R_0$  в квантующем магнитном поле. Вычисления проводятся в ци-

цилиндрической системе координат с началом  $O$  в центре КТ, при этом вектор магнитной индукции  $\vec{B}$  направлен вдоль оси  $Oz$ . Для описания одноэлектронных состояний в КТ используем потенциал конфайнмента в виде осцилляторной сферической ямы:

$$V_0(\rho, z) = \frac{m^* \omega_0^2 (\rho^2 + z^2)}{2}, \quad (1)$$

где  $m^*$  – эффективная масса электрона;  $\omega_0$  – характерная частота удерживающего потенциала КТ;  $\rho, \varphi, z$  – цилиндрические координаты;  $\rho \leq R_0$ ;  $-R_0 \leq z \leq R_0$ .

В приближении эффективной массы в симметричной калибровке векторного потенциала  $\vec{A}$  уравнение Шредингера для рассматриваемой задачи в цилиндрической системе координат запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial \Psi}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{i \hbar \omega_B}{2} \frac{\partial \Psi}{\partial \varphi} + \frac{m^*}{2} \left( \omega_0^2 + \frac{\omega_B^2}{4} \right) \rho^2 \Psi \pm \\ \pm \mu_B g B \Psi - \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + m^* \omega_0^2 z^2 / 2 = E \Psi, \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\omega_B = |e| B / m^*$  – циклотронная частота;  $|e|$  – абсолютное значение электрического заряда электрона;  $B$  – абсолютное значение вектора  $\vec{B}$ .

Решение уравнения (2) будем искать в виде произведения:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = C f_z(z) f_\rho(\rho) Y(\varphi) \psi_S, \quad (3)$$

где  $C$  – нормировочный множитель;  $f_z(z)$ ,  $f_\rho(\rho)$  – координатные части волновой функции;  $Y(\varphi)$ ,  $\psi_S$  – угловая и спиновая части волновой функции.

Учтем, что волновая функция (3) должна быть собственной функцией оператора проекции полного момента  $\hat{J}_z$  на ось  $z$ :

$$\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z, \quad (4)$$

где  $\hat{L}$  и  $\hat{S}$  – соответственно орбитальный и спиновый моменты электрона;

$$\begin{aligned} \hat{L}_z = -i \hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\sigma_z$  –  $z$ -компонента спиновых матриц Паули.

Учитывая (4) и (5), получим

$$\hat{J}_z = \hbar \begin{pmatrix} -i \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Выражение для собственных функций этого оператора легко получить:

$$Y_{m_j \mp 1/2}(\varphi) = C_\varphi \begin{pmatrix} \exp[i(m_j - 1/2)\varphi] \\ \exp[i(m_j + 1/2)\varphi] \end{pmatrix} = C_\varphi \exp[i(m_j \mp 1/2)\varphi], \quad (7)$$

где знак «-» берется, когда спин направлен параллельно оси  $Oz$ , знак «+» – когда спин антипараллелен оси  $Oz$ ;  $m_j = m + s$ ;  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  и  $s = \pm 1/2$  – магнитное и спиновое квантовые числа.

С учетом (3) и (7) уравнения, определяющие координатные  $z$ - и  $\rho$ -составляющие волновой функции, запишутся следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} f_z(z) + \frac{m^* \omega_0^2 z^2}{2} f_z(z) = E_z f_z(z); \quad (8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} f_\rho(\rho) + \frac{d^2}{d\rho^2} f_\rho(\rho) - \frac{(m_j \mp 1/2)^2}{\rho^2} f_\rho(\rho) \right) + \frac{\hbar \omega_B (m_j \mp 1/2)}{2} f_\rho(\rho) \pm \mu_B g B f_\rho(\rho) + E_z f_\rho(\rho) - E f_\rho(\rho) = 0. \quad (9)$$

Решение уравнений (8) и (9) приводит к следующему результату:

$$f_z(z) = C_z H_n \left( \frac{z}{a_0} \right) \exp \left( -\frac{z^2}{2a_0^2} \right); \quad (10)$$

$$f_1(\rho) = c_2 \left( \frac{\rho^2}{2a_1^2} \right)^{\frac{|m_j \mp 1/2|}{2}} e^{-\frac{\rho^2}{4a_1^2}} {}_1F_1 \left( \frac{1}{2} + \frac{|m_j \mp 1/2|}{2} - \frac{k^2 a_1^2}{2}, 1 + |m_j \mp 1/2|, \frac{\rho^2}{2a_1^2} \right), \quad (11)$$

где  $a_0 = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_0)}$ .

Волновая функция должна быть конечной при  $\rho \rightarrow \infty$ . Это условие можно удовлетворить, положив  $1/2 + |m_j \mp 1/2|/2 - k^2 a_1^2/2 = -n_\rho$ , где  $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ . В этом случае существует связь между вырожденной гипергеометрической функцией и полиномами Лагерра:

$${}_1F_1\left(-n_\rho, 1 + |m_j \mp 1/2|, \frac{\rho^2}{2a_1^2}\right) = \frac{n_\rho! \Gamma(1 + |m_j \mp 1/2|)}{\Gamma(n_\rho + 1 + |m_j \mp 1/2|)} L_{n_\rho}^{|m_j \mp 1/2|}\left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right). \quad (12)$$

С учетом (7), (10)–(12) выражение для волновой функции запишется в виде

$$\Psi_{n, m_j, n_\rho, s}(\rho, \varphi, z) = C_{n, m_j, n_\rho} \frac{n_\rho! \Gamma(1 + |m_j \mp 1/2|)}{\Gamma(n_\rho + 1 + |m_j \mp 1/2|)} H_n\left(\frac{z}{a_0}\right) \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right)^{\frac{|m_j \mp 1/2|}{2}} \times \\ \times L_{n_\rho}^{|m_j \mp 1/2|}\left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right) e^{-\frac{\rho^2}{4a_1^2} - \frac{z^2}{2a_0^2}} e^{i(m_j \mp 1/2)\varphi}. \quad (13)$$

Расчет нормировочного множителя  $C_{n, m_j, n_\rho}$  приводит к результату

$$C_{n, m_j, n_\rho} = \frac{[\Gamma(|m_j \mp 1/2| + n_\rho + 1)]^{1/2}}{a_1 a_0^{1/2} \sqrt{2\pi^4} \Gamma(|m_j \mp 1/2| + 1) [n! 2^n \Gamma(n_\rho + 1)]^{1/2}}. \quad (14)$$

Окончательно волновая функция (13) будет иметь вид

$$\Psi_{n, m_j, n_\rho}^\pm(\rho, \varphi, z) = \frac{\sqrt{n_\rho!}}{a_1 a_0^{1/2} \sqrt{2\pi^4} [n! 2^n \Gamma(n_\rho + 1 + |m_j \mp 1/2|)]^{1/2}} \times \\ \times H_n\left(\frac{z}{a_0}\right) L_{n_\rho}^{|m_j \mp 1/2|}\left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right) e^{i(m_j \mp 1/2)\varphi} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2}\right)^{\frac{|m_j \mp 1/2|}{2}} \exp\left[-\left(\frac{z^2}{2a_0^2} + \frac{\rho^2}{4a_1^2}\right)\right]. \quad (15)$$

Для энергетического спектра будем иметь

$$E_{n, m, n_\rho}^\pm = \frac{\hbar\omega_B(m_j \mp 1/2)}{2} + \frac{\hbar^2}{2m^* a_1^2} (2n_\rho + |m_j \mp 1/2| + 1) + \\ + \frac{\hbar^2}{m^* a_0^2} \left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \mu_B g B. \quad (16)$$

В рамках формализма функций Грина получим выражение для волновой функции электрона, локализованного на короткодействующем потенциале  $D^0$ -центра. Пусть  $D^{(-)}$ -центр расположен в точке  $\vec{R}_a = (\rho_a, \varphi_a, z_a)$ . Потенциал примеси моделируется потенциалом нулевого радиуса мощностью  $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m^*)$ , который в цилиндрической системе координат имеет вид

$$V_{\delta}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \gamma \frac{\delta(\rho - \rho_a)}{\rho} \delta(\varphi - \varphi_a) \times \\ \times \delta(z - z_a) \left[ 1 + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (17)$$

где  $\alpha$  определяется энергией  $E_i$  связанного состояния этого же  $D^{(-)}$ -центра в объемном полупроводнике.

В приближении эффективной массы волновая функция  $\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a)$  электрона, локализованного на короткодействующем потенциале, удовлетворяет уравнению Шредингера

$$\left( E_{\lambda_B}^{\pm} - \hat{H} \right) \Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \\ = V_{\delta}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) \Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a), \quad (18)$$

где  $E_{\lambda_B}^{\pm} = -\hbar^2 \lambda_B^2 / (2m^*)$  – собственные значения оператора Гамильтона  $\hat{H}_B^{\delta} = \hat{H} + V_{\delta}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a)$ .

Одноэлектронная функция Грина к уравнению Шредингера (18), соответствующая источнику в точке  $\vec{r}_1 = (\rho_1, \varphi_1, z_1)$  и энергии  $E_{\lambda_B}^{\pm}$ , запишется в виде

$$G^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{\lambda_B}^{\pm}) = \\ = \sum_{n, m, n_p} \frac{\Psi_{n, m_j, n_p}^{\pm*}(\rho_1, \varphi_1, z_1) \Psi_{n, m_j, n_p}^{\pm}(\rho, \varphi, z)}{\left( E_{\lambda_B}^{\pm} - E_{n, m, n_p} \right)}. \quad (19)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для  $D^{(-)}$ -состояния в КТ с параболическим потенциальным профилем в присутствии магнитного поля запишется как

$$\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \rho_1 d\rho_1 d\varphi_1 dz_1 G^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_1, \varphi_1, z_1; E_{\lambda_B}^{\pm}) \times \\ \times V_{\delta}(\rho_1, \varphi_1, z_1, \rho_a, \varphi_a, z_a) \Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho_1, \varphi_1, z_1; \rho_a, \varphi_a, z_a). \quad (20)$$

Подставив (17) в (20), получим

$$\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \\ = \gamma G^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}) \times \left( \hat{T} \Psi_{\lambda_B}^{(\pm)} \right) (\rho_a, \varphi_a, z_a; \rho_a, \varphi_a, z_a); \quad (21)$$

где

$$\begin{aligned} & \left( T\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)} \right) (\rho_a, \varphi_a, z_a; \rho_a, \varphi_a, z_a) \equiv \\ & \equiv \lim_{\substack{\rho \rightarrow \rho_a \\ \varphi \rightarrow \varphi_a \\ z \rightarrow z_a}} \left[ 1 + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi_{\lambda_B}^{(QW)} (\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a). \end{aligned} \quad (22)$$

Действуя оператором  $\hat{T}$  на обе части соотношения (21), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния  $E_{\lambda_B}^{\pm}$   $D^{(-)}$ -центра от параметров КТ, положения  $\vec{R}_a = (\rho_a, \varphi_a, z_a)$  примеси и значения  $B$  магнитной индукции:

$$\alpha = \frac{2\pi\hbar^2}{m^*} \left( \hat{T}G^{\pm} \right) (\rho_a, \varphi_a, z_a, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}). \quad (23)$$

Используя явный вид одночастичных волновых функций (15), а также (19), для функции Грина будем иметь

$$\begin{aligned} G^{\pm} (\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}) &= \frac{1}{2\pi^2 a_1^2 a_0} \exp \left[ -\frac{\rho_a^2 + \rho^2}{4a_1^2} - \frac{z_a^2 + z^2}{2a_0^2} \right] \times \\ & \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n \left( \frac{z}{a_0} \right) H_n \left( \frac{z_a}{a_0} \right)}{n! 2^n} \cdot \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left( \delta_{s, -\frac{1}{2}} + \delta_{s, \frac{1}{2}} \right) \left( \frac{\rho_a \rho}{2a_1^2} \right)^{|m_j \mp 1/2|} \times \\ & \times \exp \left[ i(m_j \mp 1/2)(\varphi - \varphi_a) \right] \sum_{n_p=0}^{\infty} \frac{n_p! L_{n_p}^{|m_j \mp 1/2|} \left( \frac{\rho_a^2}{2a_1^2} \right) L_{n_p}^{|m_j \mp 1/2|} \left( \frac{\rho^2}{2a_1^2} \right)}{\Gamma(n_p + 1 + |m_j \mp 1/2|)} \times \\ & \times \left( E_{\lambda_B}^{\pm} - \frac{\hbar \omega_B(m_j \mp 1/2)}{2} - \frac{\hbar^2}{2m^* a_1^2} \right) \times \\ & \times \left( 2n_p + |m_j \mp 1/2| + 1 - \frac{\hbar^2}{m^* a_0^2} \left( n + \frac{1}{2} \right) \mp \mu_B g B \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (24)$$

Функцию Грина (24) удобно записать в единицах эффективного борковского радиуса  $a_d = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2 / (m^* |e|^2)$  (где  $\epsilon_0$  – электрическая постоянная,  $\epsilon$  – статическая относительная диэлектрическая проницаемость полупроводникового вещества КТ) и эффективной боровской энергии  $E_d = \hbar^2 / (2m^* a_d^2)$ . Воспользуемся соотношением

$$\begin{aligned}
 & \left( -|E_{\lambda_B}^{\pm}| + \frac{\hbar\omega_B(m_j \mp 1/2)}{2} + \frac{\hbar^2}{2m^*a_1^2}(2n_\rho + |m_j \mp 1/2| + 1) + \right. \\
 & \left. + \frac{\hbar^2}{m^*a_0^2}\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \mu_B g B \right)^{-1} = E_d^{-1} \int_0^{+\infty} \exp \left[ -E_d^{-1} \left( -|E_{\lambda_B}^{\pm}| + \frac{\hbar\omega_B(m_j \mp 1/2)}{2} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\hbar^2}{2m^*a_1^2}(2n_\rho + |m_j \mp 1/2| + 1) + \frac{\hbar^2}{m^*a_0^2}\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \mu_B g B \right) t \right] dt = \\
 & = E_d^{-1} \int_0^{+\infty} \exp \left[ - \left( -\eta_S^2 + a_B^{*-2}(m_j \mp 1/2) + \right. \right. \\
 & \left. \left. + a_1^{*-2}(2n_\rho + |m_j \mp 1/2| + 1) + 2a_0^{*-2}\left(n + \frac{1}{2}\right) \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) t \right]. \quad (25)
 \end{aligned}$$

Здесь  $\eta_S^2 = |E_{\lambda_B}^{\pm}|/E_d$ ,  $a_0^* = a_0/a_d$ ,  $a_1^* = a_1/a_d$ ,  $a_B^* = a_B/a_d$ . Тогда выражение (24) можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 G^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}) &= - \frac{\exp \left[ -\frac{\rho_a^{*2} + \rho^{*2}}{4a_1^{*2}} - \frac{z_a^{*2} + z^{*2}}{2a_0^{*2}} \right]}{a_d^3 E_d 2\pi^2 a_1^{*2} a_0^*} \times \\
 & \times \int_0^{\infty} \exp \left[ - \left( -\eta_S^2 + a_0^{*-2} + a_1^{*-2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) t \right] \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \left( \delta_{s, -\frac{1}{2}} + \delta_{s, \frac{1}{2}} \right) \left( \frac{\rho_a \rho}{2a_1^{*2}} \right)^{|m_j \mp 1/2|} \times \\
 & \times \exp \left[ \left( i(\varphi - \varphi_a) - a_B^{*-2} t \right) (m_j \mp 1/2) - a_1^{*-2} |m_j \mp 1/2| t \right] \times \\
 & \times \sum_{n_\rho=0}^{\infty} \frac{n_\rho! L_{n_\rho}^{|m_j \mp 1/2|} \left( \frac{\rho_a^{*2}}{2a_1^{*2}} \right) L_{n_\rho}^{|m_j \mp 1/2|} \left( \frac{\rho^{*2}}{2a_1^{*2}} \right)}{(n_\rho + 1 + |m_j \mp 1/2|)!} \exp \left[ -2a_1^{*-2} n_\rho t \right] \times \\
 & \times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n \left( \frac{z}{a_0^*} \right) H_n \left( \frac{z_a}{a_0^*} \right)}{n! 2^n} \exp \left[ -2a_0^{*-2} n t \right]. \quad (26)
 \end{aligned}$$

Выделение в (26) расходящейся части, а также суммирование по квантовым числам  $n$ ,  $n_\rho$  и  $m$  с учетом того, что  $s = \pm 1/2$ , приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned}
G^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}) &= -a_d^{-3} E_d^{-1} \pi^{-\frac{3}{2}} a_0^{*-1} \times \\
&\times \int_0^{+\infty} \left[ \exp \left[ - \left( -\eta_S^2 + a_0^{*-2} + a_1^{*-2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) t \right] \right] \times \\
&\times \frac{a_0^{*2}}{2a_1^{*2}} \left( 1 - \exp \left[ -4a_0^{*-2} t \right] \right)^{-\frac{1}{2}} \left( 1 - \exp \left[ -2a_1^{*-2} t \right] \right)^{-1} \times \\
&\times \exp \left[ \frac{2z^* z_a^* \exp \left[ -2a_0^{*-2} t \right] - (z_a^{*2} + z^{*2}) \exp \left[ -4a_0^{*-2} t \right]}{a_0^{*2} \left( 1 - \exp \left[ -4a_0^{*-2} t \right] \right)} \right] \times \\
&\times \exp \left[ -\exp \left[ -2a_1^{*-2} t \right] \frac{(\rho_a^{*2} + \rho^{*2})}{2a_1^{*2} \left( 1 - \exp \left[ -2a_1^{*-2} t \right] \right)} \right] \exp \left[ - \left( \frac{\rho_a^{*2} + \rho^{*2}}{4a_1^{*2}} + \frac{z_a^{*2} + z^{*2}}{2a_0^{*2}} \right) \right] \times \\
&\times \exp \left[ \frac{1}{2} \left( \exp \left[ i(\varphi - \varphi_a) - a_B^{*-2} t \right] + \exp \left[ -i(\varphi - \varphi_a) + a_B^{*-2} t \right] \right) \right] \times \\
&\times \frac{\rho_a^* \rho^* \exp \left[ -a_1^{*-2} t \right]}{a_1^{*2} \left( 1 - \exp \left[ -2a_1^{*-2} t \right] \right)} \left. - t^{-3/2} \exp \left[ - \left( \frac{(\rho^* - \rho_a^*)^2}{4a_1^{*2}} + \frac{(z^* - z_a^*)^2}{2a_0^{*2}} \right) \frac{1}{t} \right] \right] dt + \\
&+ \sqrt{2\pi} \frac{\exp \left[ - \sqrt{2 \left( -\eta_S^2 + a_0^{*-2} + a_1^{*-2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) \left( \frac{(\rho^* - \rho_a^*)^2}{2a_1^{*2}} + \frac{(z^* - z_a^*)^2}{a_0^{*2}} \right)} \right]}{\sqrt{\left( \frac{(\rho^* - \rho_a^*)^2}{2a_1^{*2}} + \frac{(z^* - z_a^*)^2}{a_0^{*2}} \right)}} \right]. \quad (27)
\end{aligned}$$

Подставляя (27) в (23), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния от положения  $\vec{R}_a = (\rho_a, \varphi_a, z_a)$   $D^{(-)}$ -центра, параметров КТ и величины  $B$  магнитной индукции:

$$\begin{aligned}
&\sqrt{-\eta_S^2 + a_0^{*-2} + a_1^{*-2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d}} = \\
&= \frac{\eta_i}{2} - \frac{1}{a_0^* \sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} dt \exp \left[ - \left( -\eta_S^2 + a_0^{*-2} + a_1^{*-2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) t \right] \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left[ \frac{1}{t\sqrt{t}} - \sqrt{2} \frac{a_0^{*2}}{a_1^{*2}} \left(1 - e^{-4a_0^{*2}t}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2a_1^{*2}t}\right)^{-1} \exp \left[ -\frac{z_a^{*2} \left(1 - e^{-2a_0^{*2}t}\right)}{a_0^{*2} \left(1 + e^{-2a_0^{*2}t}\right)} \right] \right] \times \\ & \times \exp \left[ -\frac{\rho_a^{*2} \left(1 + e^{-2a_1^{*2}t}\right) - 4e^{-a_1^{*2}t} \operatorname{ch} \left[ a_B^{*2}t \right]}{2a_1^{*2} \left(1 - e^{-2a_1^{*2}t}\right)} \right], \end{aligned} \quad (28)$$

где  $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_d}$  – параметр, характеризующий энергию связанного состояния  $E_i$  того же  $D^{(-)}$ -центра в объемном полупроводнике.

На рис. 1 показана зависимость энергии связи  $D^{(-)}$ -состояния  $E_{\lambda_B}^{\pm}$  от величины магнитной индукции  $B$  в КТ на основе InSb для случая  $\vec{R}_a = (0, 0, 0)$ . Кривые 2 и 3 на рис. 1 соответствуют случаю антипараллельной ( $s = -1/2$ ) и параллельной ( $s = 1/2$ ) ориентации спина локализованного электрона относительно направления внешнего магнитного поля. Можно видеть, что в магнитном поле энергия связи  $D^{(-)}$ -состояния заметно возрастает за счет эффекта гибридизации размерного и магнитного квантования. Таким образом, магнитное поле оказывает стабилизирующее действие на  $D^{(-)}$ -состояния в КТ, что можно интерпретировать как эффект магнитного вымораживания  $D^{(-)}$ -состояний, который имеет место в случае антипараллельного направления спина локализованного электрона.

Как видно из (21), волновая функция электрона, локализованного на короткодействующем потенциале  $D^{(-)}$ -центра в КТ с параболическим потенциальным профилем, находящейся в магнитном поле, определяется одно-электронной функцией Грина к уравнению Шредингера:

$$\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = -C_B^{\pm} G_0^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}), \quad (29)$$

где  $G_0^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm})$  – безразмерная функция Грина:

$$G_0^{\pm}(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}) = a_0 a_1^2 \hbar \omega_0 G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda_B}^{\pm}). \quad (30)$$

Расчет нормировочного множителя  $C_B^{QD}$  в (29) для случая с  $E_{0\lambda_B} > 0$  и  $\vec{R}_a = (0, 0, 0)$  приводит к следующему результату:

$$\begin{aligned} \Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; 0, 0, 0) &= C_B^{\pm} \int_0^{+\infty} \exp \left[ -\left( -\eta_S^2 + a_0^{*2} + a_1^{*2} \pm \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) t \right] \times \\ & \times \left( 1 - \exp \left[ -4a_0^{*2} t \right] \right)^{-\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{-z^{*2} \exp \left[ -4a_0^{*2} t \right]}{a_0^{*2} \left( 1 - \exp \left[ -4a_0^{*2} t \right] \right)} \right] \left( 1 - \exp \left[ -2a_1^{*2} t \right] \right)^{-1} \times \end{aligned}$$

$$\times \exp \left[ -\frac{\rho^{*2} \exp[-2a_1^{*2}t]}{2a_1^{*2}(1 - \exp[-2a_1^{*2}t])} \right] \exp \left[ -\left( \frac{\rho^{*2}}{4a_1^{*2}} + \frac{z^{*2}}{2a_0^{*2}} \right) \right] dt. \quad (31)$$

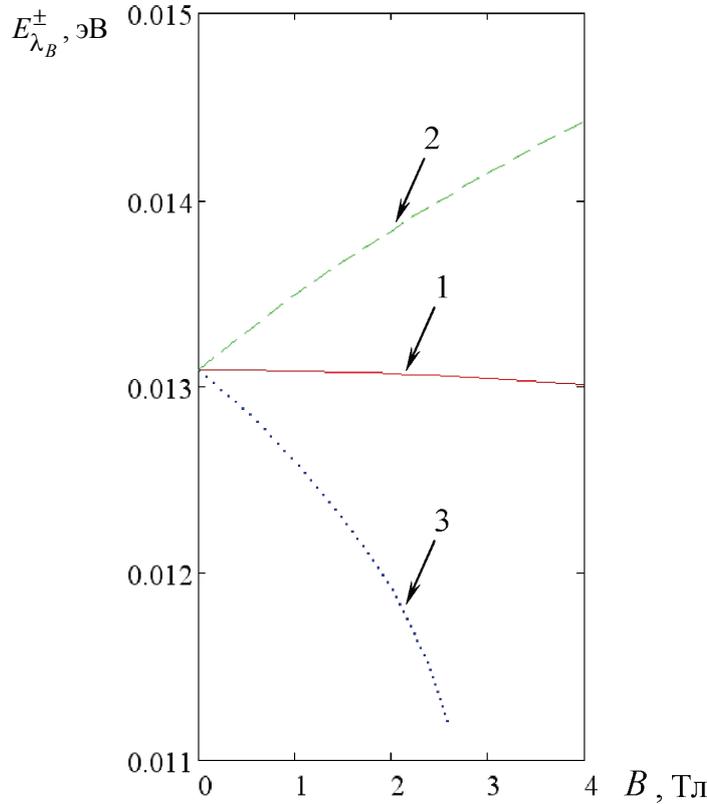


Рис. 1. Зависимость энергии связи  $E_{\lambda_B}^{\pm}$  ( $E_{\delta\lambda_B} > 0$ )  $D^{(-)}$ -состояния в КТ на основе InSb от величины магнитного поля: 1 – зависимость энергии связи  $D^{(-)}$ -центра в КТ без учета спиновых состояний ( $\bar{R}_0 = 70$  нм,  $U_0 = 0,4$  эВ); 2 –  $s = -1/2$ ; 3 –  $s = +1/2$

### 2. Аномальный квантово-размерный эффект Зеемана

Рассмотрим примесное поглощение света в квазинульмерной структуре с  $D^{(-)}$ -центрами в случае поперечной по отношению к направлению внешнего магнитного поля поляризации ( $\vec{e}_{\lambda} \perp \vec{B}$ ) света. Эффективный гамильтониан взаимодействия  $\hat{H}_{int B}^t$  с полем световой волны, характеризуемой волновым вектором  $\vec{q}_t$  и единичным вектором поляризации  $\vec{e}_{\lambda t}$ , запишется следующим образом:

$$\hat{H}_{int B}^t = -i\hbar\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\alpha^*}{m^{*2}\omega}} I_0 \exp(i\vec{q}_t \vec{r}) \left( (\vec{e}_{\lambda t} \nabla_{\vec{r}}) - \frac{i|e|B}{2\hbar} [\vec{e}_{\lambda t}, \vec{r}]_z \right). \quad (32)$$

В дипольном приближении матричные элементы  $M_{f,\lambda_B}^t$ , определяющие оптические переходы электрона из основного состояния  $D^{(-)}$ -центра

$\Psi_{\lambda_B}^{(\pm)}(\rho, \varphi, z; 0, 0, 0)$  в состоянии  $\Psi_{n, m_j, n_\rho, s}(\rho, \varphi, z)$  дискретного спектра КТ, можно представить в виде

$$\begin{aligned}
 M_{f, \lambda_B}^t &= i\lambda_0 2^2 \pi^2 \sqrt{\frac{\alpha^*}{\omega}} I_0 E_d \times \\
 &\times \frac{a_d a_1^* (-1)^{n_1} ((2n_1)!)^{\frac{1}{2}} (n_\rho + 1) \sqrt{n_\rho!} \exp(\mp i\theta) [\delta_{m_j \mp 1/2, 1} + \delta_{m_j \mp 1/2, -1}]}{a_0^{*2} n_1! [2^{2m_1} (n_\rho + 1)!]^{1/2}} \times \\
 &\times \left[ -\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{a_0^{*2}}{2a_1^{*2}}\right) \frac{\Gamma\left(-\frac{a_0^{*2}}{4} \eta_S^2 + \frac{1}{4} - \frac{a_0^{*2} \mu_B g B}{4E_d} + \frac{a_0^{*2}}{4a_1^{*2}}\right)}{\Gamma^2\left(-\frac{a_0^{*2}}{4} \eta_S^2 + \frac{3}{4} - \frac{a_0^{*2} \mu_B g B}{4E_d} - \frac{a_0^{*2}}{2a_1^{*2}}\right)} \times \right. \\
 &\times \Gamma\left(-\frac{a_0^{*2}}{4} \eta_S^2 + \frac{3}{4} - \frac{a_0^{*2} \mu_B g B}{4E_d} - \frac{a_0^{*2}}{2a_1^{*2}}\right) \times \\
 &\times \left. \left( \Psi\left(-\frac{a_0^{*2}}{4} \eta_S^2 + \frac{1}{4} - \frac{a_0^{*2} \mu_B g B}{4E_d} + \frac{a_0^{*2}}{4a_1^{*2}}\right) - \Psi\left(-\frac{a_0^{*2}}{4} \eta_S^2 + \frac{3}{4} - \frac{a_0^{*2} \mu_B g B}{4E_d} - \frac{a_0^{*2}}{2a_1^{*2}}\right) \right) \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 &\times \frac{\left(-\eta_S^2 + 2a_B^{*-2} (m_j \mp 1/2) + a_1^{*-2} (2n_\rho + 2) + a_0^{*-2} (4n_1 + 1) \pm \frac{\mu_B g B}{E_d}\right)}{\left(-\eta_S^2 + a_0^{*-2} (4n_1 + 1) + a_1^{*-2} (2n_\rho + 1) - \frac{\mu_B g B}{E_d}\right)} \times \\
 &\times \frac{1}{\left(-\eta_S^2 + a_0^{*-2} (4n_1 + 1) + a_1^{*-2} (2n_\rho + 3) - \frac{\mu_B g B}{E_d}\right)}, \quad (33)
 \end{aligned}$$

где  $(m_j \mp 1/2) = \pm 1$ .

При этом правила отбора таковы, что оптические переходы электрона из  $D^{(-)}$ -состояния со спином  $-1/2$  возможны в гибридно-квантованные состояния КТ с собственными значениями полного момента  $m_j = \begin{cases} 3/2 \\ 1/2 \end{cases} (m = 1)$ ,

либо  $m_j = \begin{cases} -1/2 \\ -3/2 \end{cases} (m = -1)$  ( $m$  – магнитное квантовое число).

Будем предполагать, что дисперсия  $u$  размеров КТ возникает в процессе фазового распада пересыщенного твердого раствора и удовлетворительно описывается формулой Лифшица – Слезова [3]:

$$P(u) = \begin{cases} \frac{3^4 e u^2 \exp[-1/(1-2u/3)]}{2^{\frac{5}{3}} (u+3)^{\frac{7}{3}} (3/2-u)^{\frac{11}{3}}}, & u < \frac{3}{2}, \\ 0, & u > \frac{3}{2}, \end{cases} \quad (34)$$

где  $u = R_0 / \overline{R_0}$ ,  $R_0$  и  $\overline{R_0}$  – радиус КТ и его среднее значение соответственно;  $e$  – основание натурального логарифма.

Тогда выражение для коэффициента примесного магнитооптического поглощения  $K_B^t(\omega)$  для случая поперечной по отношению к направлению магнитного поля поляризации  $\vec{e}_{\lambda t}$  света в квазинульмерной структуре запишется как

$$K_B^t(\omega) = \frac{2\pi\lambda_0^2 2^5 \pi^4 a_d^2 a_1^{2*} N_0 \alpha^*}{a_0^{*6} X} \times$$

$$\times \sum_{n_\rho=0}^{T_1} \sum_{n_1=0}^{T_2} \sum_{m=-1}^1 \frac{P(u_{n_\rho, m_j, n_1}) (2n_1)! (n_\rho + 1)^2 n_\rho! \exp(\mp 2i\theta)}{(n_1!)^2 [2^{2n_1} (n_\rho + 1)!] \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{2 a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right)} \times$$

$$\times \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{4} \left(-\eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} + \frac{1}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right) + \frac{1}{4}\right)}{\Gamma^2\left(\frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{4} \left(-\eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} - \frac{2}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right) + \frac{3}{4}\right)} \right] \times$$

$$\times \Gamma\left(\frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{4} \left(-\eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} - \frac{2}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right) + \frac{3}{4}\right) \times$$

$$\times \left[ \Psi\left(\frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{4} \left(-\eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} + \frac{1}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right) + \frac{1}{4}\right) - \right.$$

$$\left. - \Psi\left(\frac{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}}{4} \left(-\eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} - \frac{2}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}}\right) + \frac{3}{4}\right) \right]^{-1} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left( \frac{\left( -\eta_S^2 + 2a_B^{*-2} (m_j \pm 1/2) + a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*-2} (2n_\rho + 2) + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} + \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2}{\left( -\eta_S^2 + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} + \frac{(2n_\rho + 1)}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}} - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2} \right) \times \\
 & \times \frac{1}{\left( -\eta_S^2 + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} + \frac{(2n_\rho + 3)}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}} - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2} + \left( X + \eta_S^2 + \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) \\
 & + \frac{\left( -\eta_S^2 + 2a_B^{*-2} (m_j \pm 1/2) + a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*-2} (2n_\rho + 2) + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2}{\left( -\eta_S^2 + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} + \frac{(2n_\rho + 1)}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}} - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2} \times \\
 & \times \frac{1}{\left( -\eta_S^2 + \frac{(4n_1 + 1)}{a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}} + \frac{(2n_\rho + 3)}{a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*2}} - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right)^2} \left( X + \eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) \Bigg\}, \quad (35)
 \end{aligned}$$

где  $a_{n_\rho, m_j, n_1}^{*-2} = 2\sqrt{1 + a_0^{*4} u_{n_\rho, m_j, n_1}^2} / 4a_B^{*4} / a_0^{*2} u_{n_\rho, m_j, n_1}$ ,  $T_1 = [C_3]$  – целая часть значения выражения

$$C_3 = \left( 3 a_0^{*2} \left( X + \eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} + a_B^{*-2} \right) - 1 \right) / 2 \left( 4\sqrt{1 + 9a_0^{*4} / 16a_B^{*4}} \right) - 1;$$

$T_2 = [C_4]$  – целая часть значения выражения

$$C_4 = \left( 3 a_0^{*2} \left( X + \eta_S^2 - \frac{\mu_B g B}{E_d} + a_B^{*-2} \right) - 1 \right) / 8 - (n_\rho + 1) \sqrt{1 + 9a_0^{*4} / 16a_B^{*4}};$$

$$u_{n_\rho, m_j, n_1} = \left( -a_B^{*2} \left( 2n_1 + \frac{3}{2} \right) \left( a_0^{*2} a_B^{*2} \left( X + \eta_S^2 \mp \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) - \frac{a_0^{*2}}{a_B^{*2}} \left( m_j \mp \frac{1}{2} \right) \right) \right) +$$

$$\begin{aligned}
 & + \sqrt{a_B^{*4} \left(2n_1 + \frac{3}{2}\right)^2 \left( a_0^{*2} a_B^{*2} \left( X + \eta_S^2 \mp \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) - \frac{a_0^{*2}}{a_B^{*2}} \left( m_j \mp \frac{1}{2} \right) \right)^2 -} \\
 & \quad - a_B^{*4} \left( 4 \left( 2n_p + \left| m_j \mp \frac{1}{2} \right| + 1 \right) - \left( 2n_1 + \frac{3}{2} \right) \right) \times \\
 & \times \left( \frac{a_0^{*4} a_B^{*4}}{a_1^{*4}} \left( 2n_p + \left| m_j \mp \frac{1}{2} \right| + 1 \right) + a_0^{*2} a_B^{*2} \left( -X - \eta_S^2 \mp \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) - \frac{a_0^{*2}}{a_B^{*2}} \left( m_j \mp \frac{1}{2} \right) \right) \times \\
 & \times \left( \frac{a_0^{*4} a_B^{*4}}{a_1^{*4}} \left( 2n_p + \left| m_j \mp \frac{1}{2} \right| + 1 \right) + a_0^{*2} a_B^{*2} \left( X + \eta_S^2 \mp \frac{\mu_B g B}{E_d} \right) - \frac{a_0^{*2}}{a_B^{*2}} \left( m_j \mp \frac{1}{2} \right) \right)^{-2}.
 \end{aligned}$$

На рис. 2 представлены спектры примесного магнитооптического поглощения в квазиульмерной структуре с КТ на основе InSb, рассчитанные с помощью формулы (35). Как видно из рис. 2, для спектральных кривых характерен аномальный квантово-размерный эффект Зеемана, связанный с наличием спиновых состояний локализованного электрона.

$K_B^{(t)}(\omega), \text{ см}^{-1}$

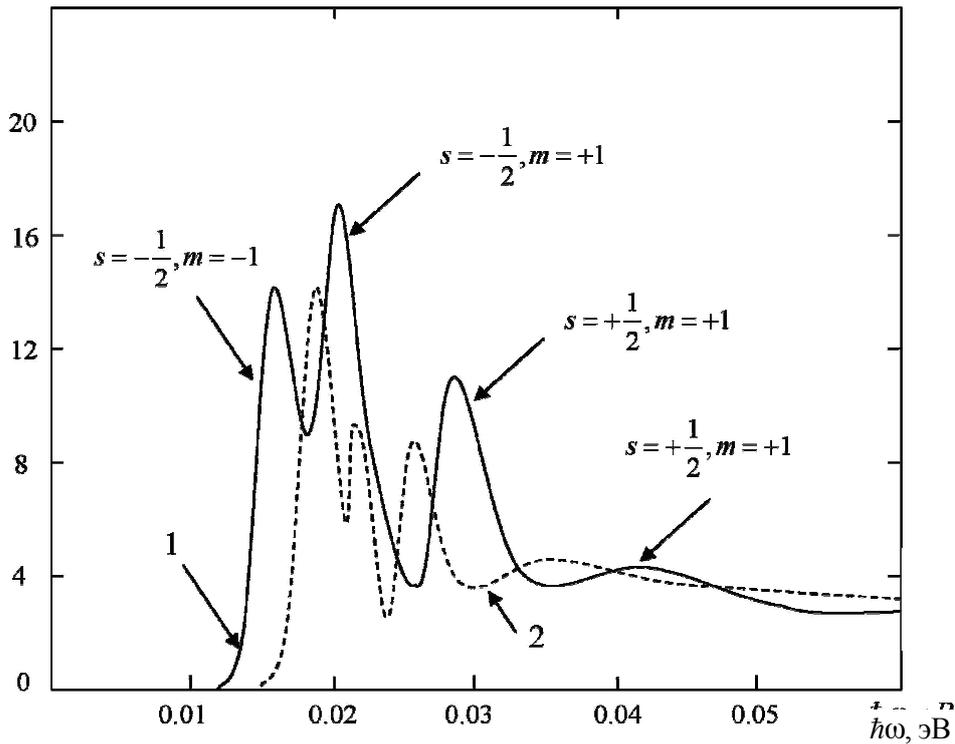


Рис. 2. Спектральная зависимость коэффициента примесного магнитооптического поглощения света в квазиульмерной структуре при  $R_0 = 70 \text{ нм}$ ,  $U_0 = 0,3 \text{ эВ}$ ,  $N_0 = 10^{22} \text{ см}^{-3}$ : 1 –  $B = 2 \text{ Тл}$ , 2 –  $B = 0 \text{ Тл}$

С ростом величины магнитного поля происходит смещение края полосы примесного поглощения в коротковолновую область спектра (см. рис. 2), при этом величина коэффициента поглощения уменьшается за счет уменьшения степени перекрытия волновых функций начального и конечного состояний. Следует также отметить, что край полосы примесного поглощения зависит от гиромангнитного отношения, что открывает определенные перспективы для исследования зонной структуры КТ.

Таким образом, в работе методом потенциала нулевого радиуса исследовано влияние спиновых состояний локализованного электрона на энергию связи квазистационарных  $D^{(-)}$ -состояний в КТ во внешнем магнитном поле. Выявлен эффект магнитного вымораживания примеси, обусловленный гибридизацией размерного и магнитного квантования, который проявляется в случае антипараллельного направления спина локализованного электрона относительно направления внешнего магнитного поля. Показано, что для спектральной зависимости коэффициента примесного магнитооптического поглощения в квазиульмерной структуре характерен аномальный квантово-размерный эффект Зеемана, который может быть использован для изучения зонной структуры и идентификации примесей в полупроводниковых КТ.

#### **Список литературы**

1. Камке, Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / Э. Камке. – М. : Наука, 1965. – 704 с.
2. Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. – М. : Физматгиз, 1962.
3. Лифшиц, И. М. О кинетике диффузионного распада пересыщенных твердых растворов / И. М. Лифшиц, В. В. Слезов // ЖЭТФ. – 1958. – Т.35. – Вып. 2 (8). – С. 479–492.

---

**Кревчик Владимир Дмитриевич**  
доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики, Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Калинина Алла Владимировна**  
аспирант, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

**Krevchik Vladimir Dmitrievich**  
Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of physics  
sub-department, Penza State University

**Kalinina Alla Vladimirovna**  
Postgraduate student,  
Penza State University

---

УДК 539.23; 539.216.1; 537.311.322

**Кревчик, В. Д.**

**Влияние спиновых состояний локализованных электронов на спектры примесного магнитооптического поглощения в квазиульмерной структуре / В. Д. Кревчик, А. В. Калинина // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 150–164.**

## ОСОБЕННОСТИ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СОСТОЯНИЙ $A^+$ -ЦЕНТРОВ В 2D-СТРУКТУРАХ

*Аннотация.* В рамках потенциала нулевого радиуса рассчитаны спектры фотолюминесценции в квантовых ямах GaAs/AlGaAs с  $A^+$  - и  $A_2^+$  -центрами. Показано, что модель  $A_2^+$  -центров в состоянии адекватно описать экспериментальные данные, свидетельствующие о существовании молекулярных состояний  $A^+$  -центров в 2D-структурах GaAs/AlGaAs.

*Ключевые слова:* молекулярное состояние акцепторных центров, квантовая яма, спектры фотолюминесценции, энергия связи, термы молекулярного иона.

*Abstract.* Within the framework of zero – range potential model in GaAs/AlGaAs quantum well with  $A^+$  and  $A_2^+$  centers are calculated. Shown that the model  $A_2^+$  centers can adequately describe the experimental evidence of the existence of molecular states  $A^+$  centers in 2D – GaAs/AlGaAs structures.

*Keywords:* molecular state of the acceptor centers, quantum well, photoluminescence spectra, binding energy, terms of the molecular ion.

### Введение

Анализ экспериментальных данных [1] позволяет сделать вывод о том, что в двумерных структурах GaAs/AlGaAs, содержащих  $A^+$  -центры, возможно существование молекулярных акцепторных состояний. Авторами было выдвинуто предположение о том, что такими примесными молекулами могут стать два близко расположенных  $A^+$  -центра, связанных за счет полярного эффекта [1]. Биполярное спаривание свободных носителей заряда в полярных полупроводниках возможно только при достаточной величине постоянной электрон-фотонного взаимодействия  $\alpha$ . По теоретическим оценкам [2], наименьшее значение  $\alpha$ , при котором возможно образование стабильных пар в двумерной структуре, составляет  $\alpha = 2,9$ , что на порядок превышает величину  $\alpha$  в GaAs  $p$ -типа. В настоящей работе предложена иная точка зрения на возникновение молекулярных состояний в структурах, содержащих квантовые ямы GaAs/AlGaAs, заключающаяся в том, что молекулярные состояния образуются  $A_2^+$  -центрами – двумя близко расположенными  $A^0$  -центрами, на которых локализована дырка.

### 1. Энергетический спектр $A^+$ -центра в полупроводниковой квантовой яме

Рассмотрим  $A^+$  -состояния в прямоугольной потенциальной яме. Будем считать, что квантовая яма (КЯ) имеет бесконечно высокие стенки. Если направить ось  $Z$  вдоль главной оси структуры, то в этом случае потенциальная энергия, отсчитываемая от «дна» ямы, может быть представлена как

$$U(z) = \begin{cases} \infty, & \text{если } z < 0, \\ 0, & \text{если } 0 \leq z \leq L, \\ \infty, & \text{если } z > L, \end{cases} \quad (1)$$

где  $L$  – ширина квантовой ямы.

Волновая функция дырки в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками имеет вид

$$\Psi_{\vec{k},n}^-(\vec{\rho}, z) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \varphi_n(z), \quad (2)$$

где  $\vec{k}$  – двумерный волновой вектор с компонентами  $k_x$  и  $k_y$ , описывающий движение дырок в плоскости интерфейсов  $(x, y)$ ;  $S$  – площадь КЯ в этой плоскости;  $\vec{\rho}$  – двумерный вектор с компонентами  $(\rho_x = x, \rho_y = y)$ . Волновая функция  $\varphi_n(z)$  имеет вид

$$\varphi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n z}{L}. \quad (3)$$

Энергия невозмущенных примесями однодырочных состояний в рассматриваемой модели будет иметь вид

$$E_{\vec{k},n}^- = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_h^* L^2}, \quad (4)$$

где  $m_h^*$  – эффективная масса дырки,  $n = 1, 2, 3, \dots$

Пусть  $A^+$ -центр расположен в точке с координатами  $x = 0, y = 0, z_a = L/2$ . Потенциал примеси описывается в рамках модели потенциала нулевого радиуса мощностью  $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m_h^*)$ , который имеет вид

$$V_{\delta}(\vec{\rho}, z, z_a) = \gamma \delta(\vec{\rho}) \delta(z - z_a) \left[ 1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (5)$$

где  $\alpha$  определяется энергией  $E_i$  связанного состояния этого же примесного центра в объемном полупроводнике;  $\delta(x)$  – дельта-функция Дирака.

Такая модель, как известно [3], применима для описания  $A^+$ -состояний, соответствующих присоединению дополнительной дырки к мелкому акцептору. В приближении эффективной массы волновая функция  $\Psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a)$  дырки, локализованной на короткодействующем потенциале примесного центра, удовлетворяет уравнению Шредингера

$$(E_{\lambda} - \hat{H}) \Psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a) = V_{\delta}(\vec{\rho}, z; z_a) \Psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a), \quad (6)$$

где  $E_{\lambda} = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$  – собственные значения оператора Гамильтона  $\hat{H}_{\delta} = \hat{H} + V_{\delta}(\vec{\rho}, z; z_a)$ .

Однодырочная функция Грина к уравнению Шредингера (6), соответствующая источнику в точке  $\vec{\eta}$  и энергии  $E_\lambda$ , запишется в виде

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \sum_n \frac{\Psi_{\vec{k},n}^*(\vec{\rho}, z; z_a) \Psi_{\vec{k},n}(\vec{\rho}, z; z)}{(E_\lambda - E_{\vec{k},n})}. \quad (7)$$

Подставляя в (7) явные выражения для волновых функций энергии дырки в прямоугольной потенциальной яме и энергии связи примесного центра, соответственно будем иметь

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{4L^2 m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k}\vec{\rho}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n z_a}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \lambda^2)}, \quad (8)$$

преобразуя подынтегральное выражение (8) к виду

$$\begin{aligned} & \frac{4L^2 m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin\left(\frac{\pi n z_a}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi n z}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \alpha^2)} = \\ & = \frac{4L m_h^*}{\hbar^2 \pi^2} \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a - z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \lambda^2)} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a + z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \lambda^2)} \right] \end{aligned} \quad (9)$$

и выполняя соответственно суммирование по  $n$  [4], получим

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a - z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \lambda^2)} = \\ & = \frac{\pi^2 \left( L\sqrt{\lambda^2 + k^2} \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|)\right) \operatorname{cosech}\left(L\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right) \right) - 1}{2L^2(\lambda^2 + k^2)}; \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos\left(\frac{\pi n [z_a + z]}{L}\right)}{n^2 + \frac{L^2}{\pi^2}(k^2 + \lambda^2)} = \\ & = \frac{\pi^2 \left( L\sqrt{\lambda^2 + k^2} \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|)\right) \operatorname{cosech}\left(L\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right) \right) - 1}{2L^2(\lambda^2 + k^2)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Окончательно для функции Грина будем иметь следующее выражение:

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech}\left(L\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right)\right) \times \\ \times \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|)\right) - \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|)\right) \right). \quad (12)$$

Выполняя в (12) интегрирование по углам с помощью равенства

$$\int_0^{2\pi} d\varphi e^{ik\rho \cos\varphi} = 2\pi J_0(k\rho), \quad (13)$$

выражение (12) можно представить в виде

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech}\left(L\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right)\right) \times \\ \times \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|)\right) - \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|)\right) \right). \quad (14)$$

Для выделения расходящейся части функции Грина к выражению (14) прибавим и вычтем интеграл Вебера

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho) e^{-\sqrt{\lambda^2 + k^2} |z - z_a|}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} = \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\lambda\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}. \quad (15)$$

Таким образом, выражение (14) можно представить в виде суммы расходящейся  $G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda)$  и регулярной  $G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda)$  частей функции Грина (14)

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) + G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda), \quad (16)$$

где соответственно

$$G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{1}{2\pi} \frac{e^{-\lambda\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}}{\sqrt{\rho^2 + (z - z_a)^2}}; \quad (17)$$

$$G_{\text{reg}}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} |z_a - z|\right) \times \right. \\ \left. \times \left( 1 - \operatorname{cth}\left(L\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right) \right) + \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - z_a - z)\right) \operatorname{cosech}\left(L\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right) \right). \quad (18)$$

Замена переменных  $\sqrt{\lambda^2 + k^2} \rightarrow t$  позволяет записать формулу (18) в виде

$$G_{\text{reg}}(\bar{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)_\lambda} \int dt J_0(\sqrt{t^2 - \lambda^2}) \times \\ \times (\text{ch}(t|z_a - z|) (1 - \text{cth}(Lt)) + \text{ch}(t(L - z_a - z)) \text{cosech}(Lt)). \quad (19)$$

Уравнение Липпмана – Швингера для  $A^+$ -состояния в КЯ запишется как

$$\Psi_\lambda(\bar{\rho}, z; z_a) = \int d\bar{\rho}_1 \int_0^L dz_1 G(\bar{\rho} - \bar{\rho}_1, z; z_1, E_\lambda) V_\delta(\bar{\rho}_1, z_1; z_a) \Psi_\lambda(\bar{\rho}_1, z_1; z_a). \quad (20)$$

Подставляя (5) в (20), получим

$$\Psi_\lambda(\bar{\rho}, z, z_a) = \gamma G(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) (\hat{T}\Psi_\lambda)(0, z_a, z_a), \quad (21)$$

где

$$(\hat{T}\Psi_\lambda)(0, z_a) \equiv \lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[ 1 + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right] \Psi_\lambda(\bar{\rho}, z). \quad (22)$$

Действуя оператором  $\hat{T}$  на обе части соотношения (22), получим уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния  $E_\lambda$  примесного центра от параметров КЯ и положения  $z_a$  примеси:

$$\frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} = (\hat{T}G)(0, z_a, z_a, E_\lambda). \quad (23)$$

Учитывая, что

$$\lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} G_{\text{reg}}(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)_\lambda} \int_0^\infty (1 - \text{cth}(Lt) + \text{ch}(t(L - z_a)) \text{cosech}(Lt)) dt = \\ = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (4\pi)L z_a} \left( z_a B_{e^{2L\lambda}} \left( 1 - \frac{z_a}{L}, 0 \right) + e^{2z_a\lambda} L {}_2F_1 \left( 1, \frac{z_a}{L}; \frac{L + z_a}{L}; e^{2L\lambda} \right) + \right. \\ \left. + 2z_a (i\pi - L\lambda + \ln(2 \text{sh}(L\lambda))) \right); \quad (24)$$

$$\lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[ (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} G_{\text{reg}}(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} G_{\text{reg}}(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) \right] = 0; \quad (25)$$

$$\lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_a}} \left[ (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} G_0(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} G_0(\bar{\rho}, z, z_a, E_\lambda) + \right.$$

$$+ G_0(\vec{\rho}, z, z_a, E_\lambda) \Big] = \frac{m_h^* \lambda}{\hbar^2 (2\pi)}, \quad (26)$$

где  $B_x(\alpha, \beta)$  – неполная бета-функция;  ${}_2F_1(a_1, a_2; b; z)$  – обобщенная гипергеометрическая функция, уравнение (23) в безразмерных величинах переписывается в виде

$$z_a^* B_{e^{2L^* \eta}} \left( 1 - \frac{z_a^*}{L^*}, 0 \right) + e^{2z_a^* \eta L^*} {}_2F_1 \left( 1, \frac{z_a^*}{L^*}; 1 + \frac{z_a^*}{L^*}; e^{2L^* \eta} \right) + 2z_a^* (i\pi + \ln(2 \operatorname{sh}(L^* \eta))) = 2L^* z_a^* \eta_i. \quad (27)$$

Здесь  $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$ ,  $\eta = \sqrt{|E_\lambda|/E_h}$ ;  $E_h = m_h^* e^4 / 2\hbar^2 \epsilon^2$  – эффективная боровская энергия с учетом эффективной массы дырки  $m_h^*$  и диэлектрической проницаемости  $\epsilon$ ;  $E_i = \hbar^2 \alpha^2 / 2m_h^{*2}$  – энергия основного состояния примесного центра в массивном полупроводнике;  $z_a^* = z_a / a_h$ ,  $a_h$  – эффективный боровский радиус дырки;  $L^* = L / a_h$ .

На рис. 1 представлены результаты численного анализа дисперсионного уравнения применительно к  $A^+$ -состояниям в КЯ GaAs при различных значениях  $E_i$ .

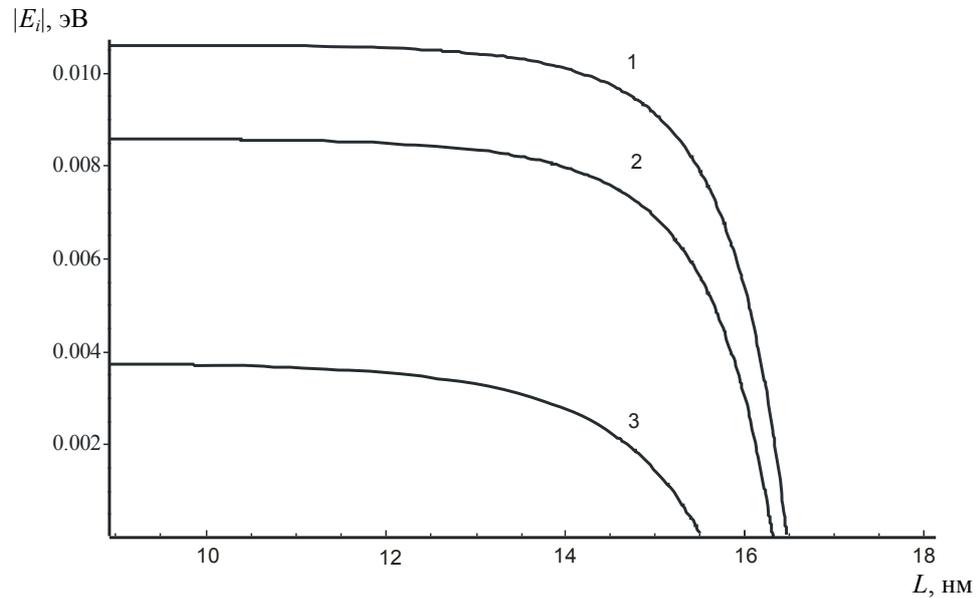


Рис. 1. Зависимость энергии связи  $|E_\lambda^{OW}|$   $A^+$ -состояния от координаты примесного центра  $L_a$  в КЯ GaAs при  $L = 18$  нм и различных значениях  $E_i$ :

1 –  $E_i = 8,6$  мэВ; 2 –  $E_i = 4$  мэВ; 3 –  $E_i = 1,08$  мэВ

Из рис. 1 видно, что в КЯ энергия связи  $A^+$ -состояния является убывающей функцией координат  $A^+$ -центра за счет квантового размерного эффекта и, как следовало ожидать, растет с ростом мощности потенциала нулевого радиуса.

## 2. Особенности энергетического спектра $A_2^+$ -центра в полупроводниковой квантовой яме

В данном разделе методом потенциала нулевого радиуса теоретически исследуются  $A_2^+$ -состояния в КЯ с потенциалом конфайнмента в виде прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками.

Двухцентровой потенциал моделируется суперпозицией потенциалов нулевого радиуса мощностью  $\gamma_i = 2\pi\hbar^2 / (\alpha_i m_h^*)$ ,  $i = 1, 2$  [5]:

$$V_\delta(\vec{\rho}, z, z_{a1}, z_{a2}) = \sum_{i=1}^2 \gamma_i \delta(\vec{\rho}) \delta(z - z_{ai}) \left[ 1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (28)$$

где  $z_{ai}$  – координаты  $A^0$ -центров вдоль оси роста структуры;  $\alpha_i$  определяется энергией  $E_i$  дырочного локализованного состояния на этих же  $A^+$ -центрах в массивном полупроводнике;  $m_h^*$  – эффективная масса дырки; при этом предполагается, что  $A^+$ -центры имеют одинаковые координаты в плоскости интерфейса  $\vec{r}_i = (\vec{\rho}, z_i)$ .

Волновая функция дырки  $\psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z_{a1}; z_{a2})$ , локализованной на  $A_2^0$ -центре, удовлетворяет уравнению Липпмана – Швингера для связанного состояния

$$\psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z, z_{a1}, z_{a2}) = \int dz_1 G(\vec{\rho}, z, z_1; E_\lambda) V_\delta(\vec{\rho}, z_1, z_{a1}, z_{a2}) \psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z_1, z_{a1}, z_{a2}), \quad (29)$$

где  $G(\vec{\rho}, z, z_1; E_\lambda)$  – однодырочная функция Грина, определяемая выражением (14) и соответствующая источнику в точке с координатами  $\vec{r} = (\vec{\rho}, z_1)$  и энергии  $E_\lambda = -\hbar^2 \lambda^2 / (2m_h^*)$ .

Подставляя двухцентровой потенциал в уравнение Липпмана – Швингера и принимая во внимание, что  $A^0$ -центры расположены на оси роста структуры КЯ с координатами  $\vec{r}_i = (0, 0, z_i)$ , получим

$$\begin{aligned} \psi_{\lambda_2}(0, z, z_{a1}, z_{a2}) = & \gamma_1 G(0, z, z_{a1}; E_\lambda) (\hat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}) + \\ & + \gamma_2 G(0, z, z_{a2}; E_\lambda) (\hat{T}_2 \psi_{\lambda_2})(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}), \end{aligned} \quad (30)$$

где

$$(\hat{T}_i \psi_{\lambda_2})(0, z_{ai}) \equiv \lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{ai}}} \left[ 1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{ai}) \frac{\partial}{\partial z} \right] \psi_{\lambda_2}(\vec{\rho}, z). \quad (31)$$

Применяя последовательно операцию  $\widehat{T}_i$  к обеим частям соотношения (31), получим систему алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} c_{1n} = \gamma_1 a_{11} c_{1n} + \gamma_2 a_{12} c_{2n}, \\ c_{2n} = \gamma_1 a_{21} c_{1n} + \gamma_2 a_{22} c_{2n}, \end{cases} \quad (32)$$

где

$$c_1 = (\widehat{T}_1 \Psi_{\lambda_2})(0, z_{a1}, z_{a1}, z_{a2}), c_2 = (\widehat{T}_2 \Psi_{\lambda_2})(0, z_{a2}, z_{a1}, z_{a2}),$$

$$a_{i,j} = (\widehat{T}_i \Psi_{\lambda_2})(0, z_{ai}, z_{aj}; E_\lambda); \quad i, j = 1, 2. \quad (33)$$

Исключив из системы (32) коэффициенты  $c_i$ , содержащие неизвестную функцию, получим дисперсионное уравнение, определяющее зависимость энергии связанного состояния  $E_\lambda$  дырки, локализованной на  $A_2^0$ -центре, от координат  $A^0$ -центров и параметров КЯ:

$$\gamma_1 a_{11} + \gamma_2 a_{22} - 1 = \gamma_1 \gamma_2 (a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}). \quad (34)$$

В случае, когда  $\gamma_1 = \gamma_2 = \gamma$ , уравнение (34) распадается на два уравнения, определяющие симметричное ( $g$ -терм) и антисимметричное ( $u$ -терм) состояния дырки соответственно:

$$\gamma a_{11} = \begin{cases} 1 - \gamma a_{12}, & \text{при } (c_1 = c_2), \\ 1 + \gamma a_{12}, & \text{при } (c_1 = -c_2). \end{cases} \quad (35)$$

Учитывая явный вид однодырочной функции Грина (14)

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \int_0^\infty \frac{dk k J_0(k\rho)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left( L \left( \sqrt{\lambda^2 + k^2} \right) \right) \times$$

$$\times \left( \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a - z|) \right) - \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda^2 + k^2} (L - |z_a + z|) \right) \right), \quad (36)$$

а также принимая во внимание, что  $a_{11}$  определяется следующим выражением:

$$a_{12} = (\widehat{T}_1 \Psi_{\lambda_2})(0, z, z_{a2}; E_\lambda) = \lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\vec{\rho}, z, z_{a2}; E_\lambda), \quad (37)$$

и учитывая, что

$$G(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) = G_0(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda) + G_{reg}(\vec{\rho}, z; z_a, E_\lambda), \quad (38)$$

для расходящейся части функции Грина получим

$$\lim_{\substack{\vec{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \vec{\rho} \frac{\partial}{\partial \vec{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_0(\vec{\rho}, z; z_{a2}, E_\lambda) = -\frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \frac{e^{-\lambda|z_{a2} - z_{a1}|}}{|z_{a2} - z_{a1}|}, \quad (39)$$

соответственно для регуляризованной функции Грина будем иметь

$$\begin{aligned} & \lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G_{reg}(\bar{\rho}, z; z_{a2}, E_\lambda) = \\ & = \frac{m_h^*}{\hbar^2 (2\pi)} \left\{ \frac{e^{-\lambda|z_{a2}-z_{a1}|}}{|z_{a2}-z_{a1}|} \left[ {}_2F_1 \left( 1, -\frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; 1 - \frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) - e^{2\lambda|z_{a2}-z_{a1}|} \times \right. \right. \\ & \quad \left. \left. \times {}_2F_1 \left( 1, -\frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; 1 + \frac{|z_{a2}-z_{a1}|}{2L}; e^{2L\lambda} \right) \right] - \frac{1}{L} \left[ \ln \left( \text{th} \left( \frac{L\lambda}{2} \right) \right) + i\pi \right] \right\}. \quad (40) \end{aligned}$$

Переходя к безразмерным переменным и вводя новую переменную  $z = |z_{a2} - z_{a1}|$ , определяющую расстояние между  $A^0$ -центрами, выражение (37) запишется в виде

$$\begin{aligned} a_{12} &= \frac{m_h^* e^{-\eta z^*}}{2\pi \hbar^2 a_h z^*} \left[ {}_2F_1 \left( 1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 - \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^* \eta} \right) - \right. \\ & \quad \left. - e^{2\eta z^*} {}_2F_1 \left( 1, -\frac{z^*}{2L^*}; 1 + \frac{z^*}{2L^*}; e^{2L^* \eta} \right) - 1 \right] - \\ & \quad - \frac{\ln \left( \text{th} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) + i\pi}{L^*} = - \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* z^*} \left[ 2e^{-\eta z^*} L^* + \right. \\ & \quad \left. + z^* \left( 2i\pi + B_{e^{2L^* \eta}} \left( -\frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{z^*}{2L^*}, 0 \right) + 2 \ln \left( \text{th} \left( \frac{L^* \eta}{2} \right) \right) \right) \right], \quad (41) \end{aligned}$$

здесь  $\eta_i = \sqrt{|E_i|/E_h}$ ,  $z_a^* = z_a/a_h$ ,  $L^* = L/a_h$ ;  $a_h$  – эффективный борковский радиус дырки;  ${}_2F_1(a, b; c; z)$  – гипергеометрическая функция Гаусса;  $B_x(\alpha, \beta)$  – неполная бета-функция. Аналогично для коэффициента  $a_{11}$  можно записать следующее выражение:

$$a_{11} = (\widehat{T}_1 \psi_{\lambda_2})(0, z, z_{a1}; E_\lambda) = \lim_{\substack{\bar{\rho} \rightarrow 0 \\ z \rightarrow z_{a1}}} \left[ 1 + \bar{\rho} \frac{\partial}{\partial \bar{\rho}} + (z - z_{a1}) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\bar{\rho}, z, z_{a1}; E_\lambda). \quad (42)$$

Учитывая явный вид соотношений (24)–(26) и переходя к переменной  $z$ , выражение (42) в безразмерных переменных можно записать в виде

$$a_{11} = \frac{m_h^*}{4\pi \hbar^2 a_h L^* (L^* + z^*)} \left[ (L^* + z^*) B_{e^{2L^* \eta}} \left( \frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0 \right) + 2L^* e^{(L^* + z^*) \eta} \times \right.$$

$$\times {}_2F_1\left(1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2}\left(3 + \frac{z^*}{L^*}\right); e^{2L^*\eta}\right) + 2(L^* + z^*)(i\pi + \ln(2\operatorname{sh}(L^*\eta))) \Bigg], \quad (43)$$

Учитывая, что  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$ , можно переписать уравнения (35) в виде

$$\frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} = a_{11} + a_{12}, \quad u\text{-терм},$$

$$\frac{\alpha m_h^*}{2\pi\hbar^2} = a_{11} - a_{12}, \quad g\text{-терм}. \quad (44)$$

Подставляя в (44) соответствующие выражения для  $a_{11}$  и  $a_{12}$ , получим в борзовских единицах дисперсионные уравнения, определяющие  $u$ - и  $g$ -термы

$$\alpha = e^{-z^*\eta} \left[ 2L^* z^* e^{(L^* + 2z^*)\eta} {}_2F_1\left(1, \frac{L^* + z^*}{2L^*}; \frac{1}{2}\left(3 + \frac{z^*}{L^*}\right); e^{2L^*\eta}\right) + \right. \\ \left. + (L^* + z^*) \left[ z^* e^{-z^*\eta} \left[ B_{e^{2L^*\eta}}\left(\frac{L^* - z^*}{2L^*}, 0\right) + \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 4i\pi \end{matrix} \right\} + \left\{ \begin{matrix} \ln(2\operatorname{sh}(L^*\eta/2)) \\ \ln(2\operatorname{ch}(L^*\eta/2)) \end{matrix} \right\} \right] \mp \right. \\ \left. \mp B_{e^{2L^*\eta}}\left(-\frac{z^*}{2L^*}, 0\right) \mp B_{e^{2L^*\eta}}\left(\frac{z^*}{2L^*}, 0\right) \right] \mp 2L^* \Bigg] = \eta_i z^* L^* (L^* + z^*), \quad (45)$$

где верхний знак соответствует  $g$ -терму, а нижний –  $u$ -терму.

На рис. 2 приведена зависимость энергии связи дырки  $|E_\lambda|$  от расстояния  $z$  между  $A^0$ -центрами, расположенными на оси размерного квантования. Можно видеть, что в случае  $g$ -терма (кривая 1)  $|E_\lambda| \rightarrow \infty$  при  $z \rightarrow 0$ , т.е. имеет место своеобразное падение на центр. Напротив, у состояния с меньшей энергией связи ( $u$ -терм, кривая 2)  $|E_\lambda|$  уменьшается при  $z \rightarrow 0$ . Таким образом, с уменьшением  $z$  возникает расщепление между вырожденными при  $z > 5$  нм  $g$ - и  $u$ -термами. В пределе, когда  $z \rightarrow \infty$ , имеем случай изолированного  $A^+$ -центра (кривая 3). С помощью кривых 1 и 2 можно определить эффективные расстояния между  $A^0$ -центрами при заданном значении энергии связи  $|E_\lambda| = 10,08$  мэВ, полученной из эксперимента [7].

### Примесная фотолюминесценция в 2D-структурах

Рассмотрим фотолюминесценцию, связанную с излучательной рекомбинацией 2D-электронов со дна зоны проводимости, и дырок, локализованных на  $A^0$ -центрах.

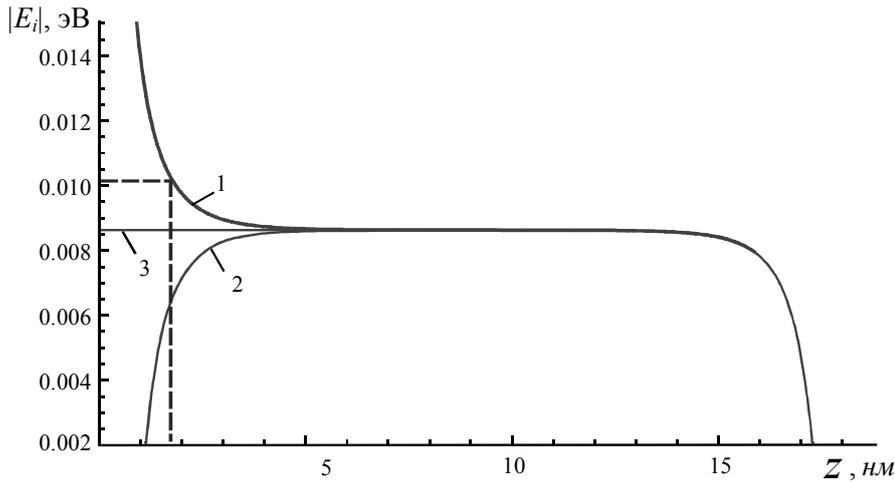


Рис. 2. Термы  $A_2^+$ -центра КЯ GaAs (штрих-пунктирная линия показы  $z$ , нм характерное расстояние между примесными центрами при энергии связи 10,08 мэВ: 1 –  $g$ -терм; 2 –  $u$ -терм; 3 – случай изолированного  $A^+$ -центра

Спектральная плотность излучения, определяемая переходом электрона из начального состояния в конечное, связана с вероятностью перехода в единицу времени [6] и с учетом дисперсии размеров КЯ определяется следующим выражением:

$$\Phi(\omega) = \frac{4\omega^2 \sqrt{\epsilon} e^2 N_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \int \sum_i \int \int |\Psi_e^*(z, \vec{\rho}) \Psi_\lambda(z, \vec{\rho},) dz d\vec{\rho}|^2 \times \right. \\ \left. \times f_G(L, \bar{L}, \sigma) d\vec{k}_e dL \delta(E_i - E_f - \hbar\omega), \right. \quad (46)$$

где  $m_0$  – масса свободного электрона;  $e$  – заряд электрона;  $P_{eh}$  – матричный элемент оператора импульса на блоховских амплитудах зонных носителей;  $\omega$  – частота излучаемой электромагнитной волны поляризации  $e_0$ ;  $\epsilon$  – диэлектрическая проницаемость материала КЯ;  $N_{A^+}$  – количество  $A^+$ -центров в КЯ.

Энергия начального состояния определяется выражением

$$E_i = E_g + \hbar^2 \pi^2 n^2 / 2 m_e^* L^2 + \hbar^2 k_e^2 / 2 m_e^*,$$

соответственно энергия конечного состояния  $E_f = \hbar^2 \lambda^2 / 2 m_h^*$  (энергия отсчитывается от потолка валентной зоны) и  $E_g$  – ширина запрещенной зоны. При этом предполагается, что дисперсия КЯ по размерам описывается гауссовским распределением

$$f_G(L, \bar{L}, \sigma) = (1/\sqrt{2\pi}\sigma) \exp\left(-\left(L - \bar{L}\right)^2 / 2\sigma^2\right),$$

где  $\bar{L}$  – средняя ширина КЯ;  $\sigma$  – среднеквадратичный разброс ширины КЯ в окрестности  $\bar{L}$ .

Волновая функция конечного состояния в случае  $A^+$ -центров берется в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{\lambda}(\vec{\rho}, z; z_a, E_{\lambda}) = & \frac{C_{A^+}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\vec{k} e^{i\vec{k}\vec{\rho}}}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \operatorname{cosech}\left(L\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right)\right) \times \\ & \times \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}(L - |z_a - z|)\right) - \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}(L - |z_a + z|)\right) \right), \end{aligned} \quad (47)$$

где константа нормировки  $C_{A^+}$  равна

$$C_{A^+} = \sqrt{\frac{2\pi\lambda \operatorname{sh}[L\lambda]}{(\operatorname{ch}[L\lambda] - \operatorname{ch}[(L - z_a)\lambda])}}. \quad (48)$$

Учитывая явный вид волновых функций электронов в зоне проводимости,

$$\Psi_e(z, \vec{k}_y) = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{i\vec{k}_e\vec{\rho}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi n z}{L}. \quad (49)$$

Интеграл от волновых функций, входящий в (46), запишется в виде

$$\begin{aligned} & \int \Psi_e^*(z, \vec{\rho}) \Psi_{\lambda}(z, \vec{\rho},) dz d\vec{\rho} = \\ & = C_{A^+} \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^2} \int d\vec{\rho} e^{-i\vec{\rho}(\vec{k} - \vec{k}_e)} \int_0^L dz \frac{1}{\sqrt{S}} \sqrt{\frac{2}{L}} \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}(L - |z_a - z|)\right) - \right. \\ & \quad \left. - \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}(L - |z_a + z|)\right) \right) \frac{\operatorname{cosech}\left(L\left(\sqrt{\lambda^2 + k^2}\right)\right)}{\sqrt{\lambda^2 + k^2}} \sin \frac{\pi n z}{L}, \end{aligned} \quad (50)$$

учитывая, что  $\int d\vec{\rho} e^{-i\vec{\rho}(\vec{k} - \vec{k}_e)} = (2\pi)^2 \delta(\vec{k} - \vec{k}_e)$ , выражение (50) перепишется в виде

$$\begin{aligned} \int \Psi_e^*(z, \vec{\rho}) \Psi_{\lambda}(z, \vec{\rho},) dz d\vec{\rho} = & C_{A^+} \int_0^L dz \sqrt{\frac{2}{L}} \frac{\operatorname{cosech}\left(L\left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}\right)\right)}{\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}} \sin \frac{\pi n z}{L} \times \\ & \times \left( \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}(L - |z_a - z|)\right) - \operatorname{ch}\left(\sqrt{\lambda^2 + k_e^2}(L - |z_a + z|)\right) \right). \end{aligned} \quad (51)$$

Интеграл в последнем выражении можно вычислить, в результате получим

$$\int \Psi_e^*(z, \vec{\rho}) \Psi_{\lambda}(z, \vec{\rho},) dz d\vec{\rho} = \frac{2\sqrt{2} \sin\left(\frac{z_a \pi n}{L}\right)}{\sqrt{S} L \left( \frac{\pi^2 n^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda^2) \right)}, \quad (52)$$

и выражение (46) запишется в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(\omega) = & \frac{4a_h^3 \omega^2 \sqrt{\varepsilon} e^2 n_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \times \\ & \times \int dL \sum_n \int d\bar{k}_e f_G(L, \bar{L}, \sigma_{A^+}) C_{A^+}^2 \frac{8 \sin\left(\frac{z_a \pi n}{L}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2 n^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda_{A^+}^2)\right)^2} \times \\ & \times \delta\left(E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m_e^* L^2} + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \lambda_{A^+}^2}{2m_h^*} - \hbar\omega\right), \end{aligned} \quad (53)$$

где  $n_{A^+}$  – концентрация  $A^+$ -центров в объеме КЯ.

В дальнейшем мы будем предполагать, что процессы люминесценции связаны с переходом электрона из нижней размерно-квантованной зоны проводимости в основное состояние  $A^+$ - и  $A_2^+$ -центров. Это вполне оправдано, если учесть, что при  $\hbar\omega \gg kT$  электроны находятся в состоянии первой размерно-квантованной подзоны.

Учет мезоскопического уширения пика примесной люминесценции требует замены  $\delta$ -функции на лоренцевский контур

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(\omega) = & \frac{4\omega^2 \sqrt{\varepsilon} e^2 n_{A^+}}{c^3} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \int dL \int d\bar{k}_e f_G(L, \bar{L}, \sigma_{A^+}) C_{A^+}^2 \times \\ & \times \frac{8 \sin\left(\frac{z_a \pi}{L}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2}{L^2} + (k_e^2 + \lambda_{A^+}^2)\right)^2} \frac{1}{2\pi} \frac{\Gamma_{A^+}}{\left(E_g + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e^* L^2} + \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m_e^*} - \frac{\hbar^2 \lambda_{A^+}^2}{2m_h^*} - \hbar\omega\right)^2 + \Gamma_{A^+}^2}, \end{aligned} \quad (54)$$

где  $\Gamma_{A^+}$  – параметр мезоскопического уширения для одноцентральной задачи.

В безразмерных переменных последнее выражение можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(X) = & \frac{16X^2 \alpha^* e^2 n_{A^+} C_{A^+}^{*2}}{c^2} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \int dL^* \int k_e^* dk_e^* f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*) \times \\ & \times \frac{\sin\left(\frac{z_a^* \pi}{L^* \bar{L}^*}\right)^2}{\left(\frac{\pi^2}{\bar{L}^2 L^{*2}} + (k_e^{*2} + \eta_{A^+}^2)\right)^2} \frac{\bar{L}^* \Gamma_{A^+}^*}{\left(G + \frac{\gamma \pi^2}{\bar{L}^2 L^{*2}} + \gamma k_e^{*2} - \eta_{A^+}^2 - X\right)^2 + \Gamma_{A^+}^{*2}}, \end{aligned} \quad (55)$$

где  $\gamma = m_h / m_e$ ,  $L^* = L / \bar{L}$ ,  $\bar{L}^* = \bar{L} / a_h$ ,  $k_e^* = k_e a_h$ ,  $\eta_{A^+} = \lambda_{A^+} a_h$ ,  $\Gamma_{A^+}^* = \Gamma_{A^+} / a_h$ ,  $X = \hbar\omega / E_h$ ,  $\sigma_{A^+}^* = \sigma_{A^+} / a_h$ ,  $z_a^* = z_a / a_h$ ,  $\alpha^*$  – постоянная тонкой структуры с учетом диэлектрической проницаемости, а коэффициент нормировки  $C_{A^+}^*$  и функция распределения  $f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*)$  в безразмерных переменных определяются следующими выражениями:

$$C_{A^+}^* = \sqrt{\frac{2\pi\eta_{A^+} \operatorname{sh}[\bar{L}L^*\eta_{A^+}]}{\left(\operatorname{ch}[\bar{L}L^*\eta_{A^+}] - \operatorname{ch}[(\bar{L}L^* - z_a^*)\eta_{A^+}]\right)}}; \quad (56)$$

$$f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma_{A^+}^*) = \left(1 / \sqrt{2\pi\sigma_{A^+}^*}\right) \exp\left[-\left(L^*\bar{L}^* - \bar{L}^*\right)^2 / 2\sigma_{A^+}^{*2}\right]. \quad (57)$$

Выполняя интегрирование по квазиимпульсу электрона, получим следующее выражение для спектральной интенсивности излучения:

$$\begin{aligned} \Phi_{A^+}(X) = & A \int dL^* \frac{C_{A^+}^2 n_{A^+} X^2 f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*) \left(\sin\left(\frac{z_a^* \pi}{\bar{L}^* L^*}\right)\right)^2}{L^* \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right)} \times \\ & \times \frac{1}{\left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma)\eta_{A^+}^2\right)^2\right)^2} \times \\ & \times \left[ k_0^* \bar{L}^{*4} L^{*4} \Gamma_{A^+}^* \left(\Gamma_{A^+}^{*2} + \left(X - G + (1 + \gamma)\eta_{A^+}^2\right)^2\right) - \right. \\ & \left. - \gamma \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) \left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right) \right] \times \\ & \times \left[ \left(\left(X + G + (1 + \gamma)\eta_{A^+}^2\right)^2 - \Gamma_{A^+}^*\right) \left(\operatorname{arctg}\left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X + \eta_{A^+}^2\right)}{\Gamma_{A^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}}\right)\right) - \right. \\ & \left. - \operatorname{arctg}\left(\frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2\right)}{\Gamma_{A^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}}\right) \right] + \Gamma_{A^+}^* \left(G - X - (1 + \gamma)\eta_{A^+}^2\right) \times \\ & \times \left(2 \ln\left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left(\eta_{A^+}^2 + k_0^*\right)\right) - 2 \ln\left(\pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A^+}^2\right) \right) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma \left( X + \eta_{A^+}^2 \right) - \right. \\
& - 2G \left( \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( X + \eta_{A^+}^2 \right) - \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( \Gamma_{A^+}^{*2} + \left( X + \eta_{A^+}^2 \right)^2 \right) \right) - \\
& \left. - \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( \pi^2 \gamma \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right) - \right. \right. \right. \\
& \left. \left. - G \left( \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right) \right) \right) \right) + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( \Gamma_{A^+}^{*2} + \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A^+}^2 \right)^2 \right) \right) \Bigg), \quad (58)
\end{aligned}$$

где при интегрировании было учтено, что при низких температурах ( $T \approx 4,3 \text{ K}$ ) верхний предел интегрирования по квазиимпульсу ограничен некоторым эффективным значением кинетической энергии электрона, определяемым главным образом соответствующей температурой образца. В безразмерных переменных верхний предел полагался равным  $k_0 = \sqrt{kT/a_h}$ , соответственно константа  $A$  определяется выражением

$$A = \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \frac{16 \pi \alpha^* e^2}{c^2}. \quad (59)$$

Рассмотрим теперь случай  $A_2^+$ -центров. Волновая функция  $A_2^+$ -состояния имеет следующий вид:

$$\begin{aligned}
\psi_{\lambda}(\bar{\rho}, z; z_a, E_{\lambda}) &= \frac{C_{A_2^+}}{(2\pi)^2} \int \frac{d\bar{k} e^{i\bar{k}\bar{\rho}}}{\sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2}} \operatorname{cosech} \left( L \left( \sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} \right) \right) \times \\
& \times \left( \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a1} - z|) \right) - \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a1} + z|) \right) + \right. \\
& \left. + \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a2} - z|) \right) - \operatorname{ch} \left( \sqrt{\lambda_{A_2^+}^2 + k^2} (L - |z_{a2} + z|) \right) \right), \quad (60)
\end{aligned}$$

где  $z_{a1}$ ,  $z_{a2}$  – координаты  $A_2^0$ -центров вдоль оси роста структуры, а константа нормировки  $C_{A_2^+}$  двуцентральной волновой функции равна

$$\begin{aligned}
C_{A_2^+} &= \left( 2\pi \lambda_{A_2^+} \operatorname{sh} \left[ L \lambda_{A_2^+} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \left( 2 \operatorname{ch} \left[ L \lambda_{A_2^+}^2 \right] - \operatorname{ch} \left[ (L - 2z_{a1}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] - \right. \\
& \left. - \operatorname{ch} \left[ (L - 2z_{a2}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] - 2 \operatorname{ch} \left[ (L - z_{a1} - z_{a2}) \lambda_{A_2^+}^2 \right] + 2 \operatorname{ch} \left[ (L - |z_{a2} - z_{a1}|) \lambda_{A_2^+}^2 \right] \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (61)
\end{aligned}$$

Спектральная плотность излучения для  $A_2^+$ -центров в безразмерных переменных с учетом лоренцева уширения примет следующий вид:

$$\begin{aligned} \Phi_{A_2^+}(X) = & \frac{16X^2 \alpha^* e^2 n_{A_2^+} C_{A_2^+}^{*2}}{c^2} \left| \frac{P_{eh} e_0}{m_0} \right|^2 \times \\ & \times \int dL^* \int k_e^* dk_e^* \frac{f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*)}{\left( \frac{\pi^2}{L^{*2}} + (k_e^{*2} + \eta_{A_2^+}^2) \right)^2} \left( \sin \left( \frac{z_{a1}^* \pi}{L^*} \right) + \right. \\ & \left. + \sin \left( \frac{z_{a2}^* \pi}{L^*} \right) \right)^2 \frac{\bar{L}^* \Gamma_{A_2^+}^*}{\left( G + \frac{\gamma \pi^2}{L^{*2}} + \gamma k_e^{*2} - \eta_{A_2^+}^2 - X \right)^2 + \Gamma_{A_2^+}^{*2}}, \end{aligned} \quad (62)$$

где  $n_{A_2^+}$  – концентрация  $A_2^+$ -центров в объеме КЯ;  $\Gamma_{A_2^+}^*$  – параметр мезоскопического уширения в случае двуцентральной задачи, а константа нормировки  $C_{A_2^+}^*$  в безразмерных переменных определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} C_{A_2^+} = & \left( 2\pi \eta_{A_2^+} \operatorname{sh} \left[ L \eta_{A_2^+} \right] \right)^{\frac{1}{2}} \left( 2 \operatorname{ch} \left[ L \eta_{A_2^+}^2 \right] - \operatorname{ch} \left[ (L - 2z_{a1}) \eta_{A_2^+}^2 \right] - \right. \\ & \left. - \operatorname{ch} \left[ (L - 2z_{a2}) \eta_{A_2^+}^2 \right] - 2 \operatorname{ch} \left[ (L - z_{a1} - z_{a2}) \eta_{A_2^+}^2 \right] + 2 \operatorname{ch} \left[ (L - |z_{a2} - z_{a1}|) \eta_{A_2^+}^2 \right] \right)^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (63)$$

где  $z_{a1}^* = z_{a1} / a_h$ ,  $z_{a2}^* = z_{a2} / a_h$ .

После интегрирования в безразмерных переменных соответственно получим выражение, определяющее спектральную интенсивность излучения для двуцентральной задачи:

$$\begin{aligned} \Phi_{A_2^+}(X) = & A \int dL^* \times \\ & \frac{C_{A_2^+}^2 n_{A_2^+} X^2 f_G(L^*, \bar{L}^*, \sigma^*) \left( \sin \left( \frac{z_{a1}^* \pi}{L^*} \right) + \sin \left( \frac{z_{a2}^* \pi}{L^*} \right) \right)^2}{L^* \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( \eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) \left( \Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left( X - G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right)^2} \times \\ & \times \left( k_0^* \bar{L}^{*4} L^{*4} \Gamma_{A_2^+}^* \left( \Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left( X - G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) - \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\gamma \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( \eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) \times \\
& \times \left( \left( \left( X + G + (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 - \Gamma_{A_2^+}^* \right) \arctg \left( \frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( X + \eta_{A_2^+}^2 \right)}{\Gamma_{A_2^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) - \right. \\
& \left. - \arctg \left( \frac{G \bar{L}^{*2} L^{*2} + \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right)}{\Gamma_{A_2^+}^* \bar{L}^{*2} L^{*2}} \right) \right) + \Gamma_{A_2^+}^* \left( G - X - (1 + \gamma) \eta_{A_2^+}^2 \right) \times \\
& \times \left( 2 \ln \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( \eta_{A_2^+}^2 + k_0^* \right) \right) - 2 \ln \left( \pi^2 + \bar{L}^{*2} L^{*2} \eta_{A_2^+}^2 \right) + \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma \left( X + \eta_{A_2^+}^2 \right) - 2G \left( \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( X + \eta_{A_2^+}^2 \right) - \bar{L}^{*2} L^{*2} \pi^2 \gamma + \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( \Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left( X + \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) \right) \right) - \right. \\
& \left. - \ln \left( G^2 \bar{L}^{*4} L^{*4} + \pi^4 \gamma^2 - 2 \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( \pi^2 \gamma \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right) - \right. \right. \right. \\
& \left. \left. \left. - G \left( \pi^2 \gamma - \bar{L}^{*2} L^{*2} \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right) \right) \right) + \bar{L}^{*4} L^{*4} \left( \Gamma_{A_2^+}^{*2} + \left( X - k_0^* \gamma + \eta_{A_2^+}^2 \right)^2 \right) \right) \right), \quad (64)
\end{aligned}$$

где  $n_{A_2^+}$  – концентрация  $A_2^+$ -центров в КЯ.

На рис. 3 представлены кривые спектральной зависимости в случае примесной фотолюминесценции с участием  $A^+$ - и  $A_2^+$ -центров. При численных расчетах применялись следующие численные значения величин:  $\eta_1 = 0,45$ ,  $\eta_2 = 0,504$ , что соответствует энергии связи  $A^+$ -центров  $E_{A^+\lambda} = 8,6$  мэВ и  $A_2^+$ -центров  $E_{A_2^+\lambda} = 10,08$  мэВ [7]. При этом эффективная масса электрона и масса дырки считались равными  $m_e = 0,07 m_0$ ,  $m_h = 0,45 m_0$ , где  $m_0$  – масса свободного электрона. Исходя из экспериментальных данных [1], полуширина пиков фотолюминесценции принималась равной соответственно  $\Gamma_{A^+} = 0,0017$  эВ и  $\Gamma_{A_2^+} = 0,0025$  эВ, а ширина запре-

щенной зоны в приближении эффективной массы, исходя из экспериментальных данных [7], полагалась равной  $E_g = 1,51$  эВ.

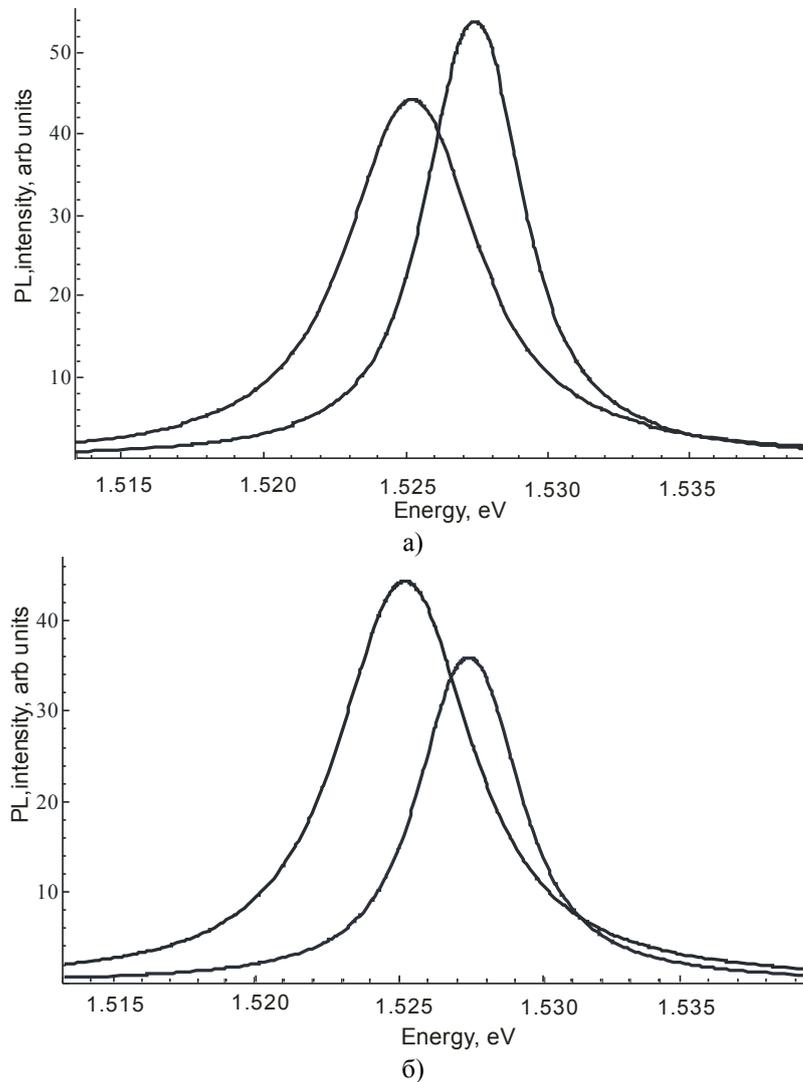


Рис. 3. Спектральная зависимость примесной фотолуминесценции при различных значениях концентрации  $A^+$  - и  $A_2^+$  -центров: а -  $n_{A^+} / n_{A_2^+} = 50$ , б -  $n_{A^+} / n_{A_2^+} = 33$

Из рис. 3 видно, что интенсивность спектральной зависимости сильно зависит от концентрации  $A^+$  - и  $A_2^+$  -центров. С уменьшением концентрации  $A^+$  -центров интенсивность соответствующей линии падает, а интенсивность линии, соответствующей  $A_2^+$  -центрам, растет. Такое поведение амплитуд линий фотолуминесценции можно объяснить тем, что с увеличением степени легирования отдельные  $A^+$  -центры постепенно переходят в  $A_2^+$  -состояния. Следует также отметить хорошее согласие между значениями энергий, на которые приходятся максимумы амплитуд теоретических и эксперименталь-

ных линий фотолюминесценции [1]. Таким образом, анализ, проведенный в данной работе, позволяет утверждать, что модель  $A_2^+$ -центров в состоянии адекватно описать экспериментальные данные, свидетельствующие о существовании молекулярных состояний  $A^+$ -центров в 2D-структурах GaAs/AlGaAs.

### Список литературы

1. **Петров, П. В.** Молекулярное состояние  $A^+$ -центров в квантовых ямах GaAs/AlGaAs / П. В. Петров, Ю. Л. Иванов, А. Е. Жуков // ФТП. – 2007. – Т. 41. – № 7. – С. 850.
2. **Smondryev, M. A.** Polaron effect in GaAs/AlGaAs quantum wells / M. A. Smondryev, J. T. Devreese, F. M. Peeters // Phys. Rev. B. 46. – 1995. – V. 51. – P. 15008.
3. **Кревчик, В. Д.** Особенности поглощения света глубокими примесными центрами в тонких полупроводниковых слоях / В. Д. Кревчик, Э. З. Имамов // ФТП. – 1983. – Т. 17. – № 7. – P. 1235.
4. **Прудников, А. П.** Интегралы и ряды / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев. – М.: Наука, 1981.
5. **Кревчик, В. Д.** Термы одномерного молекулярного иона  $D_2^-$  в продольном магнитном поле / В. Д. Кревчик, А. Б. Грунин, М. Б. Семенов, А. А. Марко, В. Ч. Жуковский // Вестник Московского государственного университета. – 2004. – V. 5. – С. 7. – (Сер. 3. Физика, астрономия).
6. **Леванюк, А. П.** Краевая люминесценция прямозонных полупроводников / А. П. Леванюк, В. В. Осипов // УФН. – 1981. – Т. 133. – С. 427.
7. **Петров, П. В.** Роль флуктуаций потенциала в энергетической структуре квантовых ям GaAs/AlGaAs с  $A^+$ -центрами / П. В. Петров, Ю. Л. Иванов, В. С. Михрин, А. Е. Жуков // ФТП. – 2008. – Т. 42. – № 10. – С. 1219.

#### **Кревчик Владимир Дмитриевич**

доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики, Пензенский государственный  
университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

#### **Krevchik Vladimir Dmitrievich**

Doctor of physical and mathematical  
sciences, professor, head of physics  
sub-department, Penza State University

#### **Левашов Александр Владимирович**

кандидат физико-математических наук,  
доцент, кафедра физики, Пензенский  
государственный университет

E-mail: physics@pnzgu.ru

#### **Levashov Alexander Vladimirovich**

Candidate of physical and mathematical  
sciences, associate professor,  
sub-department of physics,  
Penza State University

УДК 539.23; 539.216.1

#### **Кревчик, В. Д.**

**Особенности молекулярных состояний  $A^+$ -центров в 2D-структурах /**  
В. Д. Кревчик, А. В. Левашов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2010. – № 4 (16). – С. 165–183.

## **Вниманию авторов!**

Редакция журнала «Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки» приглашает специалистов опубликовать на его страницах оригинальные статьи, содержащие новые научные результаты в области математики, физики, механики, а также обзорные статьи по тематике журнала.

Статьи, ранее опубликованные, а также принятые к опубликованию в других журналах, редколлегией не рассматриваются.

Редакция принимает к рассмотрению статьи, подготовленные с использованием текстового редактора Microsoft Word for Windows версий не выше 2003.

Необходимо представить статью в электронном виде (VolgaVuz@mail.ru, дискета 3,5", CD-диск) и дополнительно на бумажном носителе в двух экземплярах.

Оптимальный объем рукописи 10–14 страниц формата А4. Основной шрифт статьи – Times New Roman, 14 pt через полуторный интервал. Тип файла в электронном виде – RTF.

Статья **обязательно** должна сопровождаться индексом УДК, краткой аннотацией и ключевыми словами **на русском и английском языках**.

Рисунки и таблицы должны быть размещены в тексте статьи и представлены в виде отдельных файлов (растровые рисунки в формате TIFF, BMP с разрешением 300 dpi, векторные рисунки в формате Corel Draw с минимальной толщиной линии 0,75 pt). Рисунки должны сопровождаться подрисуночными подписями.

Формулы в тексте статьи выполняются в редакторе формул Microsoft Word Equation, версия 3.0 и ниже. Символы греческого и русского алфавита должны быть набраны прямо, нежирно; латинского – курсивом, нежирно; обозначения векторов и матриц прямо, жирно; цифры – прямо, нежирно. Наименования химических элементов набираются прямо, нежирно. Эти же требования **необходимо** соблюдать и в рисунках. Допускается вставка в текст специальных символов (с использованием шрифтов Symbol).

В списке литературы **нумерация источников** должна соответствовать **очередности ссылок** на них в тексте ([1], [2], ...). Номер источника указывается в квадратных скобках. В списке указывается:

- для книг – фамилия и инициалы автора, название, город, издательство, год издания, том, количество страниц;
- для журнальных статей, сборников трудов – фамилия и инициалы автора, название статьи, полное название журнала или сборника, серия, год, том, номер, выпуск, страницы;
- для материалов конференций – фамилия и инициалы автора, название статьи, название конференции, время и место проведения конференции, город, издательство, год, страницы.

В конце статьи допускается указание наименования программы, в рамках которой выполнена работа, или наименование фонда поддержки.

К материалам статьи **должна** прилагаться информация для заполнения учетного листа автора: фамилия, имя, отчество, место работы и должность, ученая степень, ученое звание, адрес, контактные телефоны (желательно сотовые), e-mail.

Плата с аспирантов за публикацию рукописей не взимается.

Рукопись, полученная редакцией, не возвращается.

Редакция оставляет за собой право проводить редакторскую и допечатную правку текстов статей, не изменяющую их основного смысла, без согласования с автором.

**Статьи, оформленные без соблюдения приведенных выше требований, к рассмотрению не принимаются.**