

**КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

ВІСНИК

**КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА**

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №3 2018

Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка,

випуск №2, 2018,

Серія фізико-математичні науки

З 1991 року серії вісників Київського університету “Математика і механіка”, “Фізика”, “Моделирование и оптимизация сложных систем” реорганізовано у “Вісник Київського університету. Серія: фізико-математичні науки”. У віснику містяться результати нових досліджень у різних галузях математики, інформатики, механіки, фізики та радіофізики для наукових працівників, викладачів, аспірантів, інженерів і студентів. Друкується за рекомендаціями Вчених Рад фізичного, механіко-математичного факультетів, факультету радіофізики, електроніки та комп’ютерних систем і факультету комп’ютерних наук та кібернетики.

Журнал “Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки” включено до переліку фахових видань ВАК України, в яких можуть публікуватися результати дисертаційних робіт на здобуття наукових ступенів доктора і кандидата наук (затверджено наказом Міністерства освіти і науки України №1222 від 07.10.2016), та реферується в Реферативному журналі, Zentralblatt MATH.

Редакційна колегія:

Козаченко Юрій Васильович, д.ф.-м.н., проф., **головний редактор;**

Розора Ірина Василівна, к.ф.-м.н., доц., **зам. головного редактора;**

Bartlova Milada, Ph. D., Brno University of Technology, Brno, Czech Republic;

Bavula Vladimir, Prof., University of Sheffield, Great Britain;

Beghin Luisa, Prof., Sapienza Università di Roma, Italy;

Futory Vyacheslav, Prof., Universidade de São Paulo, Brazil;

Giuliano Rita, Prof., Università di Pisa, Italy;

Gorlatch Sergei, Dr. Sci. (habil.), Prof., University of Muenster, Muenster, Germany;

Hudak Stefan, Dr. Sci., Prof., Technical University of Kosice, Kosice, Slovak Republic;

Kukhtarev Nickolai, Prof., Alabama A&M University, Alabama, USA;

Leonenko Nikolay, Prof., Cardiff University, Great Britain;

Medvids Arturs, Dr. Phys. (habil.), Prof., Riga Technical University, Riga, Latvia;

Olenko Andriy, Prof., La Trobe University, Australia;

Orsingher Enzo, Prof., Sapienza University of Rome, Italy;

Ostrovsky Eugene, Prof., Bar-Ilan University, Israel;

Pogany Tibor, Prof., University of Rijeka, Croatia;

Rontó Miklós, Dr. Sci., Prof., University of Miskolc, Miskolc, Hungary;

Silvestrov Dmitrii, Prof., Stockholms universitet, Sweden;

Sottinen Tommi, Prof., University of Vaasa, Finland;

Toru Aoki, Ph. D., Prof., Research Institute of Electronics, Shizuoka University, Shizuoka, Japan;

Trofimchuk Sergey, Prof., Universidad de Talca, Instituto de Matematica y Fisica, Talca, Chile;

Volodin Andrei, Prof., University of Regina, Canada;

Акіменко Віталій Володимирович, д.т.н., проф.;

Анісімов Ігор Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;

Анісімов Анатолій Васильович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;

Безущак Оксана Омелянівна, к.ф.-м.н., доцент;

Буй Дмитро Борисович, д.ф.-м.н., проф.;

Булавін Леонід Анатолійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;

Волошин Олексій Федорович, д.т.н., проф.;

Гарашенко Федір Георгійович, д.т.н., проф.;

Єжов Станіслав Миколайович, д.ф.-м.н., проф.;

Жук Ярослав Олександрович, д.ф.-м.н., проф.;

Заславський Володимир Анатолійович, д.т.н., проф.;

Кириченко Володимир Васильович, д.ф.-м.н., проф.;

Козаченко Юрій Васильович, д.ф.-м.н., проф.;

Курченко Олександр Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;

Кудін Володимир Іванович, д.т.н., с.н.с.;

Львов Віктор Анатолійович, д.ф.-м.н., проф.;

Макара Володимир Арсенійович, чл.-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;

Макарець Микола Володимирович, д.ф.-м.н., проф.;

Майборода Ростислав Євгенович, д.ф.-м.н., проф.;

Моклячук Михайло Павлович, д.ф.-м.н., проф.;

Пашко Анатолій Олексійович, д.ф.-м.н., проф.;

Перестюк Микола Олексійович, акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф.;

Петравчук Анатолій Петрович, д.ф.-м.н., проф.;

Погорілий Сергій Дем’янович, д.т.н., проф.;

Розора Ірина Василівна, к.ф.-м.н., доц.;
Савенков Сергій Миколайович, д.ф.-м.н., доц.;
Скришевський Валерій Антонович, д.ф.-м.н., проф.;
Сливка-Тилишак Ганна Іванівна, д.ф.-м.н., проф.;
Хусаїнов Денис Ях'євич, д.ф.-м.н., проф.;

Редакційний відділ:

Затула Дмитро Васильович, **відповідальний секретар**;
Безущак Оксана Омелянівна, bezusch@univ.kiev.ua;
Стукаленко Вікторія Віталіївна, stu@univ.kiev.ua;
Родіонова Тетяна Василівна, rodtv@univ.kiev.ua;
П'ятецька Олена Василівна, visnyk.phys-math@ukr.net;
Отто Георгій Костянтинівич, **технічний редактор**, ottogk@gmail.com.

Адреса редакційної колегії:

Факультет комп'ютерних наук та кібернетики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
пр. Глушкова, 4 д, 03680 Тел. (044) 259-01-49
fm.visnyk@ukr.net
ISBN 978-966-2142
ISSN 1812-5409

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

Аветісян Д.А., Шевченко Г.М. Оцінювання параметру дифузії стохастичного рівняння теплопровідності з білим шумом	9
Іванов О.В., Каптур Н.В., Савич І.М. Консистентність оцінок Коенкера-Бассетта в лінійній моделі регресії	17
Мірошниченко В.О. Узагальнений метод найменших квадратів для суміші нелінійних регресій	25
Розора І.В. Швидкість збіжності для оцінки імпульсної перехідної функції у просторі неперервних функцій	30
Тилищак О.А. Про незвідність мономіальних матриць 7-го порядку над локальними кільцями	37

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

Зімін О.І., Кулініч Г.Л. Про асимптотичну поведінку математичного сподівання повної енергії гармонічного осцилятора при випадковому збуренні	47
Петрова Т.О. Один контрприклад для опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну, при $r > 4$	53

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

Бевза М. В. Об'єднання вбудовувань для покращення регуляризації нейронних мереж для задачі розпізнавання іменованих сутностей	59
Нікітін А. В., Балясникова О. А. Оптимізація функціоналів в умовах невизначеності для стохастичних диференціальних рівнянь Іто-Скорохода у гільбертових просторах	65
Слабоспицький О.С. Рекурентний алгоритм для оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів з найменшими відхиленнями від точок "тяжіння" для білінійних дискретних динамічних систем	71

РАДІОФІЗИКА

П'ятецька О.В. Чисельно-аналітичний розв'язок задачі про демпфірування ізотермічних коливань прямокутної в'язкопружної пластини	77
---	----

СУЧАСНА ФІЗИКА

Бур'ян С. А., Гребньов О.А., Сисоєв В.М., Ісаєв М.В. Особливості оцінки контактного кута на наномасштабі	83
Грідякіна О.В., Бордюг Г.Б., Білоус О.І. Нелінійно-оптичні властивості рідкокристалічних середовищ на основі метал-алканоатів	89
Конончук Г.Л. Особливості взаємодії фізичного вакууму та світлових хвиль	95
Макаренко О. В., Завалістий О. І., Ямпольський А. Л., Поперенко Л. В. Особливості змін оптичного відгуку в межах поверхневого оксидного шару в Si та GaAs	99
Ніколаєнко Т. Ю. Визначення дипольних моментів ковалентних зв'язків за допомогою CLPO-аналізу	105
Сиволожський О. А., Овсієнко І. В., Мацуй Л. Ю., Лень Т. А. Особливості інтеркаляції вуглецевих наноматеріалів, що містять нанотрубки	109

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

Avetisian D.A., Shevchenko G.M. Estimation of diffusion parameter for stochastic heat equation with white noise	9
Ivanov O.V., Kaptur N.V., Savych I.M. Consistency of Konker-Bassett estimators in linear regression model	17
Miroshnychenko V.O. Generalized least squares estimates for mixture of nonlinear regressions	25
Rozora I.V. Convergence rate for the estimator of impulse response function in the space of continuous functions	30
Tylyshchak O.A., On irreducibility of monomial 7×7 -matrix over local ring	37

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

Zimin O. I., Kulinich G. L. About asymptotic behavior of the mathematical expectation of the total energy of the harmonic oscillator with random perturbation	47
Petrova T. O. One counterexample for convex approximation of function with fractional derivatives, $r > 4$	53

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATICS

Bevza M. V. Tying of embeddings for improving regularization in neural networks for named entity recognition task	59
Nikitin A.V., Baliasnikova O. A. Optimization of functionals under uncertainties for Ito-Skorokhod stochastic differential equations in Hilbert spaces	65
Slabospitsky A.S. Recurrent algorithm for non-stationary parameter estimation by least squares method with least deviations from 'attraction' points for bilinear discrete dynamic systems	71

RADIOPHYSICS

Pyatetska O.V. Numerical-analytic solution of the problem about the damping isothermal vibrations of viscoelastic rectangular plates	77
--	----

MODERN PHYSICS

Burian S.A., Hrebnov O.A., Sysoev V.M., Isaiev M.V. The features of the contact angle evaluation at the nanoscale	83
Gridyakina O. V., Bordyuh H. B., Bilous O. I. Nonlinear optical properties of metal-alkanoate liquid crystalline media	89
Kononchuk G.L. Peculiarities of interaction of Physical vacuum and light waves	95
Makarenko O.V., Zavalisty O. I., Yampolskiy A. L., Poperenko L. V. Features of changes in optical response within the surface oxide layer in Si and GaAs	99
Nikolaienko T. Yu. Determination of the covalent bond dipole moments with CLPO analysis	105
Syvolozhskiy O. A., Ovsienko I. V., Matzui L. Yu., Len T. A. The peculiarity of intercalation of carbon nanomaterials containing nanotubes	109

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.21

Д.А. Аветисян, *магістр*
Г.М. Шевченко, *д.ф.-м.н., професор*

**Оцінювання параметру дифузії
стохастичного рівняння
теплопровідності з білим шумом**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володи-
мирська, 64.

У роботі розглядається стохастичне диференціальне рівняння в часткових похідних, а саме стохастичне диференціальне рівняння теплопровідності з білим шумом. Побудовано статистичну оцінку параметру дифузії, досліджено властивості отриманої оцінки, а саме конзистентність та асимптотична нормальність.

Ключові слова: стохастичне диференціальне рівняння теплопровідності, оцінка, асимптотична нормальність, конзистентність.

This paper deals with stochastic differential heat equation which is the typical example of stochastic partial differential equations (SPDE). In particular, paper is devoted to the estimation of diffusion parameter σ for the random field which is the solution of stochastic differential heat equation for \mathbb{R}^d , $d = 1, 2, 3$. The estimation of diffusion parameter was constructed in accordance with observations on the grid. It was shown that the constructed estimate is strictly consistent and asymptotically normal, the asymptotic variance was calculated.

Key Words: stochastic partial differential equations, stochastic differential heat equation, estimate, asymptotical normality, consistency.

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Introduction

Stochastic partial differential equations (SPDEs) appeared in literature in the mid-70s of the last century. One of the first publications to consider such was Walsh's work [1]. SPDEs had been introduced due to necessity of modeling and describing of random phenomena in physics, chemistry and biology (problems of filtration in different substances, wave propagation in random environment, diffusion processes under the various conditions, modeling of biology populations) on one hand and due to development of analysis and the theory of random processes, on another.

This paper deals with stochastic heat equation, which is a typical example of SPDE. Specifically, paper is devoted to the estimation of diffusion parameter σ for the random field being the solution of following stochastic heat equation with a Gaussian white noise \dot{W} in dimension $d = 1, 2, 3$:

$$\left(\frac{\partial u}{\partial t} - \frac{1}{2}\Delta u\right)(t, x) = \sigma \dot{W}(x), t > 0, x \in \mathbb{R}^d, \\ u(0, x) = 0, x \in \mathbb{R}^d. \quad (1)$$

D.A. Avetisian, *MSc*
G.M. Shevchenko, *Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.*

**Estimation of diffusion parameter for
stochastic heat equation with white noise**

Taras Shevchenko National University of
Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrskaya st.,

According to [1], the solution to such equation is given by

$$u(t, x) = \sigma \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} G(t-s, x-y) W(dy) ds, \quad (2) \\ t \geq 0, x \in \mathbb{R}^d,$$

where function G is the Green function defined as

$$G(t, x) = \begin{cases} (2\pi t)^{-d/2} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2t}\right), & \text{if } t > 0, \\ \delta_0(x) & \text{if } t = 0. \end{cases}$$

Statistical formulation of the problem is the following: for a fixed time $t > 0$ and a fixed step $\delta > 0$, the random field u given by (2) is observed on the grid

$$D_N = \{(i_1\delta, \dots, i_d\delta), i_1, \dots, i_d \in \{1, \dots, N\}\}.$$

Our aim is to construct an estimator for σ based on these observations and to study its asymptotic properties as $N \rightarrow \infty$. Our approach is based on the ergodicity, as a function of spatial variable x , of the random field u .

2 Properties of u

We first establish some properties of the solution u .

Theorem 2.1. 1. The field $u(t, x)$ given by (2) is well defined with

$$E[u(t, x)^2] = \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(2\pi(s_1 + s_2))^{d/2}} ds_1 ds_2 = \begin{cases} \frac{4(2-\sqrt{2})t^{3/2}}{3\sqrt{\pi}}, & d = 1 \\ \frac{t \ln 2}{\pi}, & d = 2 \\ \frac{2(-1+\sqrt{2})\sqrt{t}}{\pi^{3/2}}, & d = 3. \end{cases} \quad (3)$$

2. For the fixed $t \in [0, T]$, the random field $u(t, \cdot)$ is stationary.

3. For $d = 1$, the following is true:

$$\begin{aligned} \text{cov}(u(t, 0), u(t, x)) &= \frac{2 \exp\left(-\frac{x^2}{2t}\right)}{3\sqrt{2\pi}} t^{3/2} - \\ &- \frac{2\sqrt{t}x^2 \exp\left(-\frac{x^2}{2t}\right)}{3\sqrt{2\pi}} + \frac{2|x|^3}{3} - \frac{4|x|^3}{3} \Phi\left(\frac{|x|}{\sqrt{t}}\right) + \\ &+ 4tx \Phi\left(\frac{x}{\sqrt{2t}}\right) - 2tx - \frac{1}{3} \sqrt{\frac{t}{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2t}\right) \times \\ &\left[\left(5\sqrt{2} - 8 \exp\left(\frac{x^2}{4t}\right)\right) t + \left(\sqrt{2} - 2 \exp\left(\frac{x^2}{4t}\right)\right) x^2 \right. \\ &\left. + 6 \exp\left(\frac{x^2}{4t}\right) \sqrt{\pi t} x \left(2\Phi\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) - 1\right) \right] + \\ &+ \frac{2|x|^3}{3} \Phi\left(\frac{|x|}{\sqrt{2t}}\right). \end{aligned}$$

Proof. 1. The integral in (2) is well defined if the integrand is square integrable.

$$\begin{aligned} v^2 &= E(u(t, x))^2 = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_0^t (G(t-s, x-y)) ds \right)^2 dy \end{aligned}$$

Let introduce the substitution $t-s \rightarrow s$, in that case

$$v^2 = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_0^t G(s, x-y) ds \right)^2 dy$$

At next steps we will use the properties of function G

$$v^2 = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_0^t G(s, x-y) ds \right)^2 dy =$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathbb{R}^d} \left(\int_0^t s^{-d/2} G\left(1, \frac{x-y}{\sqrt{s}}\right) ds \right)^2 dy = \\ &= \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(s_1 s_2)^{d/2} (2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(-\frac{1}{2s_1} |x-y|^2\right) \times \\ &\quad \exp\left(-\frac{1}{2s_2} |x-y|^2\right) dy ds_1 ds_2 = \\ &= \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(s_1 s_2)^{d/2} (2\pi)^d} \times \\ &\quad \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(-\frac{|x-y|^2 (s_1 + s_2)}{2s_1 s_2}\right) dy ds_1 ds_2 = \\ &= \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(s_1 s_2)^{d/2} (2\pi)^d} \left(\frac{2s_1 s_2 \pi}{s_1 + s_2}\right)^{d/2} ds_1 ds_2 = \\ &= \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(2\pi(s_1 + s_2))^{d/2}} ds_1 ds_2. \end{aligned}$$

The last integral exists for $1 \leq d \leq 3$. Computing it for each case $d = 1, 2, 3$, we arrive at (3). Thereby, the field $u(t, x)$ given by formula (2) is well defined.

2. Let us transform the covariance:

$$\begin{aligned} \text{cov}(u(t, z), u(t, z+x)) &= \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G(t-s_1, z-h) ds_1 \times \\ &\quad \times \int_0^t G(t-s_2, z+x-h) ds_2 dy = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G(u_1, -y) du_1 \int_0^t G(u_2, x-y) du_2 dy. \end{aligned}$$

Since the expression does not depend on z , the field is stationary.

3. Let us evaluate the covariance:

$$\begin{aligned} \text{cov}(u(t, 0), u(t, x)) &= \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G(s_1, x-y) ds_1 \int_0^t G(s_2, -y) ds_2 dy = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G\left(1, \frac{|x-y|}{\sqrt{s_1}}\right) \frac{ds_1}{\sqrt{s_1}} \times \\ &\quad \times \int_0^t G\left(1, \frac{|y|}{\sqrt{s_2}}\right) \frac{ds_2}{\sqrt{s_2}} dy = \\ &= \int_0^t \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{2s_1} - \frac{|y|^2}{2s_2}\right) \frac{dy ds_1 ds_2}{2\pi\sqrt{s_1 s_2}} = \\ &= \int_0^t \int_0^t \exp\left(-\frac{|x|^2}{2(s_1 + s_2)}\right) \frac{ds_1 ds_2}{\sqrt{2\pi(s_1 + s_2)}} = \\ &= \int_0^t \sqrt{\frac{u}{2\pi}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2u}\right) du + \end{aligned}$$

$$+ \int_t^{2t} \frac{2t-u}{\sqrt{2\pi u}} \exp\left(-\frac{|x|^2}{2u}\right) du,$$

where in the last equality we have integrated over $s_1 + s_2 = u$. A direct computation then gives the required formula. \square

Theorem 2.2. *For fixed $t > 0$, the random field $\{u(t, x), x \in \mathbb{R}^d\}$ is ergodic.*

Proof. Since the field $\{u(t, x), x \in \mathbb{R}^d\}$ is centered Gaussian, it suffices to prove that

$$\begin{aligned} r(x) &= \text{cov}(u(t, 0), u(t, x)) = \\ &= Eu(t, 0)u(t, x) \rightarrow 0, x \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Using the definition of the function G , we have

$$\begin{aligned} r(x) &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G(t-s_1, x-y) ds_1 \times \\ &\times \int_0^t G(t-s_2, -y) ds_2 dy = \\ &= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^t G\left(1, \frac{|x-y|}{\sqrt{s_1}}\right) \frac{ds_1}{(s_1)^{d/2}} \times \\ &\times \int_0^t G\left(1, \frac{|-y|}{\sqrt{s_2}}\right) \frac{ds_2}{(s_2)^{d/2}} dy = \\ &= \int_0^t \int_0^t \int_{\mathbb{R}^d} \exp\left(-\frac{|x-y|^2}{2s_1} - \frac{|y|^2}{2s_2}\right) \times \\ &\times \frac{dy ds_1 ds_2}{(2\pi)^d (s_1 s_2)^{d/2}} = \\ &= \int_0^t \int_0^t \exp\left(-\frac{|x|^2}{s_1 + s_2}\right) \frac{ds_1 ds_2}{(2\pi(s_1 + s_2))^{d/2}} \rightarrow \\ &\rightarrow 0, x \rightarrow \infty. \quad \square \end{aligned}$$

3 Main results

By the results of the previous section, the field $u(t, x_k), k \in \mathbb{Z}^d$ is strictly stationary and ergodic. Therefore, for any Borel function $g: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ such that $E|g(u(t, 0))| < \infty$, thanks to ergodic theorem, almost surely it holds that

$$\frac{1}{Nd} \sum_{x_k \in D_N} g(u(t, x_k)) \rightarrow Eg(u(t, x)), N \rightarrow \infty. \quad (4)$$

This gives the idea to consider the following estimator for σ^2 :

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{1}{Nd v^2} \sum_{x_k \in D_N} u(t, x_k)^2,$$

where

$$\begin{aligned} v^2 &= \int_0^t \int_0^t \frac{1}{(2\pi(s_1 + s_2))^{d/2}} ds_1 ds_2 = \\ &= \begin{cases} \frac{4(2-\sqrt{2})t^{3/2}}{3\sqrt{\pi}}, & d = 1, \\ \frac{t \ln 2}{\pi}, & d = 2, \\ \frac{2(-1+\sqrt{2})\sqrt{t}}{\pi^{3/2}}, & d = 3. \end{cases} \end{aligned}$$

Taking into account (4), we we have the following theorem.

Theorem 3.1. *$\hat{\sigma}^2$ is a strictly consistent estimator for the parameter σ^2 for $N \rightarrow \infty$, it means*

$$\hat{\sigma}^2 \rightarrow \sigma, N \rightarrow \infty, a.s.$$

Now let us investigate the asymptotic normality of the estimator $\hat{\sigma}^2$. Consider the case $d = 1$; for other cases the proofs are similar.

Denote

$$\tilde{V}_N = \frac{V_N - E[V_N]}{D(V_N)},$$

where

$$V_N = \sum_{k=1}^N u(T, x_k)^2.$$

Since \tilde{V}_N is an element of the second Wiener chaos (w.r.t. the noise W), we may use the Nualart–Peccati Fourth moment theorem [4].

Consider first the variance of V_N .

Lemma 1. *The following convergence is true:*

$$\begin{aligned} \frac{D(V_N)}{N} &\rightarrow 2\sigma^4 + 4 \sum_{i=1}^{\infty} \rho(i)^2 = \\ &= 2 \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho(i)^2, N \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (5)$$

where

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= D(u(T, x_1)) \\ \rho(i) &= \text{cov}(u(T, x_i), u(T, 0)). \end{aligned}$$

Proof. Transform

$$\begin{aligned} D(V_N) &= D\left(\sum_{k=1}^N u(T, x_k)^2\right) = \sum_{k=1}^N D(u(T, x_k)^2) + \\ &+ 2 \sum_{k=j} \text{cov}(u(T, x_k)^2, u(T, x_j)^2) = \\ &= N\sigma^2 + 2 \sum_{i=1}^{N-1} (N-i) \text{cov}(u(T, x_i)^2, u(T, 0)^2) = \\ &= 2N\sigma^4 + 4 \sum_{i=1}^{N-1} (N-i)\rho(i)^2. \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned} \frac{D(V_N)}{N} &= 2\sigma^4 + 4 \sum_{i=1}^{N-1} \left(1 - \frac{i}{N}\right) \rho(i)^2 = \\ &= 2\sigma^4 + 4 \sum_{i=1}^{\infty} \left(1 - \frac{i}{N}\right)^+ \rho(i)^2. \end{aligned}$$

Since $(1 - \frac{i}{N})^+ \rho(i)^2 \uparrow \rho(i)^2, N \rightarrow \infty$ and $\sum_{i=1}^{\infty} \rho(i)^2 < \infty$, then, thanks to the dominated convergence,

$$\frac{D(V_N)}{N} \rightarrow 2\sigma^4 + 4 \sum_{i=1}^{\infty} \rho(i)^2, N \rightarrow \infty. \quad \square$$

Lemma 2. *The following convergence is true:*

$$\begin{aligned} \frac{E(V_N - EV_N)^4}{N^2} &\rightarrow 12\sigma^8 + \\ &+ 48\sigma^4 \sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2 + 48 \left(\sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2\right)^2 = \\ &= 12 \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \rho(m)^2\right)^2, N \rightarrow \infty. \end{aligned} \quad (6)$$

Proof. Write

$$E(V_N - EV_N)^4 = E\left(\sum_{k=1}^N (u(T, x_k)^2 - \sigma^2)\right)^4.$$

Define $u(T, x_k)^2 - \sigma^2 = Z_k$. Since $u(T, x_k) \sim N_k(0, \sigma^2)$, we have $u(T, x_k) - \rho(0) \sim \sigma^2(N_k(0, 1) - 1) =: \sigma^2(N_k - 1)$. Now write

$$\begin{aligned} E(V_N - EV_N)^4 &= E\left(\sum_{k=1}^N Z_k\right)^4 = \\ &= \sum_{k=1}^N EZ_k^4 + 4 \sum_{i_1 \neq i_2} EZ_{i_1}^3 Z_{i_2} + 3 \sum_{i_1 \neq i_2} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2}^2 + \\ &+ 6 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2} Z_{i_3} + \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3 \neq i_4} EZ_{i_1} Z_{i_2} Z_{i_3} Z_{i_4}, \end{aligned}$$

where $\sum_{i_1 \neq \dots \neq i_j}$ denotes the sum over all j -tuples (i_1, \dots, i_j) of distinct indices from $\{1, \dots, N\}$.

We now consider each term separately.

$$\begin{aligned} EZ_k^4 &= \sigma^8 E(N_k^2 - 1)^4 = \\ &= \sigma^8 (EN_k^8 - 4EN_k^6 + 6EN_k^4 - 4EN_k^2 + 1) = \\ &= \sigma^8 (7!! - 4 \cdot 5!! + 6 \cdot 3!! - 4 \cdot 1!! + 1) = 70\sigma^8. \end{aligned}$$

Further,

$$EZ_{i_1}^3 Z_{i_2} = \sigma^8 E((N_{i_1}^2 - 1))^3 (N_{i_2}^2 - 1).$$

Denoting by H_j the j th Hermite polynomial, we have

$$(x^2 - 1)^3 = H_6(x) + 12H_4(x) + 30H_2(x) + 8,$$

therefore, using the Isserlis formula [6],

$$\begin{aligned} EZ_{i_1}^3 Z_{i_2} &= \sigma^8 E((N_{i_1}^2 - 1))^3 (N_{i_2}^2 - 1) = \\ &= \sigma^8 E(H_6(N_{i_1}) + 12H_4(N_{i_1}) + \\ &+ 30H_2(N_{i_1}) + 8) H_2(N_{i_2}) = \\ &= 30\sigma^8 E(H_2(N_{i_1}) H_2(N_{i_2})) = \\ &= 60\sigma^8 [E(N_{i_1} N_{i_2})]^2 = 60\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2. \end{aligned}$$

Further,

$$EZ_{i_1}^2 Z_{i_2}^2 = \sigma^8 E((N_{i_1}^2 - 1)^2 (N_{i_2}^2 - 1)^2)$$

Since

$$(x^2 - 1)^2 = x^4 - 2x^2 + 1 = H_4(x) + 4H_2(x) + 2,$$

we have

$$\begin{aligned} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2}^2 &= \sigma^8 E((N_{i_1}^2 - 1)^2 (N_{i_2}^2 - 1)^2) = \\ &= \sigma^8 E(H_4(N_{i_1}) + 4H_2(N_{i_1}) + 2) \times \\ &\quad \times (H_4(N_{i_2}) + 4H_2(N_{i_2}) + 2) = \\ &= \sigma^8 E(H_4(N_{i_1}) H_4(N_{i_2}) + 16H_2(N_{i_1}) H_2(N_{i_2}) + 4) = \end{aligned}$$

$$= \sigma^8 E(H_4(N_{i_1})H_4(N_{i_2})) + 32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8$$

Let us calculate $E(H_4(N_{i_1})H_4(N_{i_2}))$ separately:

$$\begin{aligned} E(H_4(N_{i_1})H_4(N_{i_2})) &= \\ &= E(N_{i_1}^4 - 6N_{i_1}^2 + 3)(N_{i_2}^4 - 6N_{i_2}^2 + 3) = \\ &= E(N_{i_1}^4 N_{i_2}^4 - 6N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 + 3N_{i_1}^4 - 6N_{i_1}^2 N_{i_2}^4 + \\ &+ 36N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 - 18N_{i_1}^2 + 3N_{i_2}^4 - 18N_{i_2}^2 + 9) \end{aligned}$$

Using the Isserlis formula, we obtain

$$\begin{aligned} EN_{i_1}^4 N_{i_2}^4 &= 9(EN_{i_1}^2)^2 (EN_{i_2}^2)^2 + \\ + 72EN_{i_1}^2 EN_{i_2}^2 (EN_{i_1} N_{i_2})^2 + 24(EN_{i_1} N_{i_2})^4 &= \\ = 9 + 72(EN_{i_1} N_{i_2})^2 + 24(EN_{i_1} N_{i_2})^4 \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} EN_{i_1}^4 N_{i_2}^2 &= 3EN_{i_1}^2 (EN_{i_2}^2)^2 + \\ + 12EN_{i_1}^2 (EN_{i_1} N_{i_2})^2 &= 3 + 12(EN_{i_1} N_{i_2})^2. \end{aligned}$$

Substituting this result into initial formula, we get

$$\begin{aligned} E(H_4(N_{i_1})H_4(N_{i_2})) &= \\ &= E(N_{i_1}^4 N_{i_2}^4 - 6N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 + 3N_{i_1}^4 - 6N_{i_1}^2 N_{i_2}^4 + \\ + 36N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 - 18N_{i_1}^2 + 3N_{i_2}^4 - 18N_{i_2}^2 + 9) &= \\ = 9 + 72(EN_{i_1} N_{i_2})^2 + 24(EN_{i_1} N_{i_2})^4 - \\ - 6(3 + 12(EN_{i_1} N_{i_2})^2) + 3 \cdot 3 - \\ - 6(3 + 12(EN_{i_1} N_{i_2})^2) + 36(1 + 2(EN_{i_1} N_{i_2})^2) - \\ - 18 + 3 \cdot 3 - 18 + 9 = \\ = 24(EN_{i_1} N_{i_2})^4. \end{aligned}$$

Consequently,

$$\begin{aligned} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2}^2 &= \sigma^8 E(H_4(N_{i_1})H_4(N_{i_2})) + \\ + 32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8 &= \\ = 24\rho(i_1 - i_2)^4 + 32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8. \end{aligned}$$

Now

$$\begin{aligned} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2} Z_{i_3} &= \sigma^8 E(N_{i_1}^2 - 1)^2 (N_{i_2}^2 - 1) \times \\ \times (N_{i_3}^2 - 1) &= \sigma^8 E(N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 - N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 - \\ - N_{i_1}^4 N_{i_3}^2 + N_{i_1}^4 - 2N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 + 2N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 + \\ + 2N_{i_1}^2 N_{i_3}^2 - 2N_{i_1}^2 + N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 - N_{i_2}^2 - N_{i_3}^2 + 1). \end{aligned}$$

By the Isserlis formula,

$$\begin{aligned} EN_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 &= EN_{i_1}^2 EN_{i_2}^2 EN_{i_3}^2 + \\ + 2EN_{i_1}^2 (EN_{i_2} N_{i_3})^2 + 2EN_{i_2}^2 (EN_{i_1} N_{i_3})^2 + \\ + 2EN_{i_3}^2 (EN_{i_1} N_{i_2})^2 &+ \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} + 8EN_{i_1} N_{i_2} EN_{i_1} N_{i_3} EN_{i_2} N_{i_3}; \\ EN_{i_1}^4 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 &= 3(EN_{i_1}^2)^2 EN_{i_2}^2 EN_{i_3}^2 + \\ + 12EN_{i_1}^2 EN_{i_2}^2 (EN_{i_1} N_{i_3})^2 + \\ + 12EN_{i_1}^2 EN_{i_3}^2 (EN_{i_1} N_{i_2})^2 + \\ + 6(EN_{i_1}^2)^2 (EN_{i_2} N_{i_3})^2 + \\ + 48EN_{i_1}^2 EN_{i_1} N_{i_2} EN_{i_2} N_{i_3} EN_{i_1} N_{i_3} + \\ + 24(EN_{i_1} N_{i_2})^2 (EN_{i_1} N_{i_3})^2. \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned} EZ_{i_1}^2 Z_{i_2} Z_{i_3} &= \sigma^8 E(N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 - N_{i_1}^4 N_{i_2}^2 - \\ - N_{i_1}^4 N_{i_3}^2 + N_{i_1}^4 - 2N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 + \\ + 2N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 + 2N_{i_1}^2 N_{i_3}^2 - 2N_{i_1}^2 + \\ + N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 - N_{i_2}^2 - N_{i_3}^2 + 1) &= \\ = 3\sigma^8 + 12\sigma^4 \rho(i_1 - i_3)^2 + \\ + 12\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 6\sigma^4 \rho(i_2 - i_3)^2 + \\ + 48\sigma^2 \rho(i_1 - i_2) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_1 - i_3) + \\ + 24\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_1 - i_3)^2 - 3\sigma^8 - \\ - 12\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 - 3\sigma^8 - 12\sigma^4 \rho(i_1 - i_3)^2 + \\ + 3\sigma^8 - 2(\sigma^8 + 2\sigma^4 \rho(i_2 - i_3)^2 + \\ + 2\sigma^4 \rho(i_1 - i_3)^2 + 2\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + \\ + 8\sigma^2 \rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3)) + \\ + 2\sigma^8 + 4\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 2\sigma^8 + \\ + 4\sigma^4 \rho(i_1 - i_3)^2 - 2\sigma^8 + 2\sigma^4 \rho(i_2 - i_3)^2 = \\ = 32\sigma^2 \rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3) + \\ + 24\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_1 - i_3)^2 + 4\sigma^4 \rho(i_2 - i_3)^2. \end{aligned}$$

Finally,

$$\begin{aligned} EZ_{i_1} Z_{i_2} Z_{i_3} Z_{i_4} &= \sigma^8 E(N_{i_1}^2 - 1)(N_{i_2}^2 - 1) \times \\ \times (N_{i_3}^2 - 1)(N_{i_4}^2 - 1) &= \sigma^8 E(N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 N_{i_4}^2 - \\ - N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 - N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_4}^2 + N_{i_1}^2 N_{i_2}^2 - \\ - N_{i_1}^2 N_{i_3}^2 N_{i_4}^2 + N_{i_1}^2 N_{i_3}^2 + N_{i_1}^2 N_{i_4}^2 - \\ - N_{i_1}^2 - N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 N_{i_4}^2 + N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 + \\ + N_{i_2}^2 N_{i_4}^2 - N_{i_2}^2 + N_{i_3}^2 N_{i_4}^2 - N_{i_3}^2 - N_{i_4}^2 + 1). \end{aligned}$$

By the Isserlis formula,

$$\begin{aligned} EN_{i_1}^2 N_{i_2}^2 N_{i_3}^2 N_{i_4}^2 &= EN_{i_1}^2 EN_{i_2}^2 EN_{i_3}^2 EN_{i_4}^2 + \\ + 2(EN_{i_1}^2 EN_{i_2}^2 (EN_{i_3} N_{i_4})^2 + EN_{i_1}^2 EN_{i_3}^2 (EN_{i_2} N_{i_4})^2 + \\ + EN_{i_1}^2 EN_{i_4}^2 (EN_{i_2} N_{i_3})^2 + EN_{i_2}^2 EN_{i_3}^2 (EN_{i_1} N_{i_4})^2 + \\ + EN_{i_2}^2 EN_{i_4}^2 (EN_{i_1} N_{i_3})^2 + EN_{i_3}^2 EN_{i_4}^2 (EN_{i_1} N_{i_2})^2) + \\ + 8(EN_{i_1}^2 EN_{i_2} N_{i_3} EN_{i_3} N_{i_4} EN_{i_2} N_{i_4} + \\ + EN_{i_2}^2 EN_{i_1} N_{i_3} EN_{i_3} N_{i_4} EN_{i_1} N_{i_4} + \\ + EN_{i_3}^2 EN_{i_1} N_{i_4} EN_{i_2} N_{i_4} EN_{i_1} N_{i_2} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &+EN_{i_4}^2 EN_{i_1} N_{i_2} EN_{i_2} N_{i_3} EN_{i_1} N_{i_3}) + \\
 &+4((EN_{i_1} N_{i_2})^2 (EN_{i_3} N_{i_4})^2 + \\
 &+(EN_{i_1} N_{i_3})^2 (EN_{i_2} N_{i_4})^2 + \\
 &+(EN_{i_1} N_{i_4})^2 (EN_{i_2} N_{i_3})^2) + \\
 &+16(EN_{i_1} N_{i_2} EN_{i_2} N_{i_3} EN_{i_3} N_{i_4} EN_{i_1} N_{i_4} + \\
 &+EN_{i_1} N_{i_3} EN_{i_2} N_{i_3} EN_{i_1} N_{i_4} EN_{i_2} N_{i_4} + \\
 &+EN_{i_1} N_{i_2} EN_{i_1} N_{i_3} EN_{i_2} N_{i_4} EN_{i_3} N_{i_4}).
 \end{aligned}$$

Thus, we have

$$\begin{aligned}
 EZ_{i_1} Z_{i_2} Z_{i_3} Z_{i_4} &= 4(\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 + \\
 &+\rho(i_1 - i_3)^2 \rho(i_2 - i_4)^2 + \rho(i_1 - i_4)^2 \rho(i_2 - i_3)^2) + \\
 &+16(\rho(i_1 - i_2) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_3 - i_4) \rho(i_1 - i_4) + \\
 &+\rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_1 - i_4) \rho(i_2 - i_4) + \\
 &+\rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_4) \rho(i_3 - i_4)).
 \end{aligned}$$

Collecting everything,

$$\begin{aligned}
 E(V_N - EV_N)^4 &= 70N\sigma^8 + 240\sigma^4 \sum_{i_1 \neq i_2} \rho(i_1 - i_2)^2 + \\
 &+3 \sum_{i_1 \neq i_2} (24\rho(i_1 - i_2)^4 + 32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8) + \\
 &+6 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} (32\sigma^2 \rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3) + \\
 &+24\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_1 - i_3)^2 + 4\sigma^4 \rho(i_2 - i_3)^2) + \\
 &+ \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3 \neq i_4} (4\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 + \\
 &+4\rho(i_1 - i_3)^2 \rho(i_2 - i_4)^2 + 4\rho(i_1 - i_4)^2 \rho(i_2 - i_3)^2) + \\
 &+16\rho(i_1 - i_2) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_3 - i_4) \rho(i_1 - i_4) + \\
 &+16\rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_1 - i_4) \rho(i_2 - i_4) + \\
 &+16\rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_4) \rho(i_3 - i_4)) = \\
 &= 70N\sigma^8 + \sum_{j=1}^8 A_{j,N},
 \end{aligned}$$

where

$$\begin{aligned}
 A_{1,N} &= 240\sigma^4 \sum_{i_1 \neq i_2} \sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2, \\
 A_{2,N} &= 72 \sum_{i_1 \neq i_2} \rho(i_1 - i_2)^4, \\
 A_{3,N} &= 3 \sum_{i_1 \neq i_2} (32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8), \\
 A_{4,N} &= 144 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_1 - i_3)^2, \\
 A_{5,N} &= 192\sigma^2 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3),
 \end{aligned}$$

$$A_{6,N} = 24\sigma^4 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_2 - i_3)^2,$$

$$\begin{aligned}
 A_{7,N} &= 4 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3 \neq i_4} (\rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 + \\
 &+\rho(i_1 - i_3)^2 \rho(i_2 - i_4)^2 + \rho(i_1 - i_4)^2 \rho(i_2 - i_3)^2),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &A_{8,N} = 16 \times \\
 &\times \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3 \neq i_4} (\rho(i_1 - i_2) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_3 - i_4) \rho(i_1 - i_4) + \\
 &+\rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_3) \rho(i_1 - i_4) \rho(i_2 - i_4) + \\
 &+\rho(i_1 - i_2) \rho(i_1 - i_3) \rho(i_2 - i_4) \rho(i_3 - i_4)).
 \end{aligned}$$

Let is consider each sum separately:

$$\begin{aligned}
 A_{1,N} &= 240\sigma^4 \sum_{i_1 \neq i_2} \rho(i_1 - i_2)^2 = |i_1 - i_2 = m| = \\
 &= 480\sigma^4 \sum_{m=1}^{N-1} (N - m) \rho(m)^2.
 \end{aligned}$$

Therefore,

$$\frac{A_{1,N}}{N^2} \leq \frac{480\sigma^4}{N} \sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2 \rightarrow 0, N \rightarrow \infty.$$

Further,

$$\begin{aligned}
 A_{2,N} &= 72 \sum_{i_1 \neq i_2} 24\rho(i_1 - i_2)^4 = |i_1 - i_2 = m| = \\
 &= 144 \sum_{k=1}^{N-1} (N - m) \rho(m)^4.
 \end{aligned}$$

Similarly to $A_{1,N}$, $\frac{A_{2,N}}{N^2} \rightarrow 0, N \rightarrow \infty$. Further,

$$\begin{aligned}
 A_{3,N} &= 3 \sum_{i_1 \neq i_2} (32\sigma^4 \rho(i_1 - i_2)^2 + 4\sigma^8) = \\
 &= 192\sigma^4 \sum_{m=1}^{N-1} (N - m) \rho(m)^2 + 12\sigma^8(N^2 - N).
 \end{aligned}$$

Hence,

$$\frac{A_{3,N}}{N^2} \rightarrow 12\sigma^8, N \rightarrow \infty.$$

Denoting $i_1 - i_2 = m, i_1 - i_3 = n$, we can estimate

$$\begin{aligned}
 A_{4,N} &= 144 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_1 - i_3)^2 \leq \\
 &\leq 144N \sum_{m,n=-N}^N \rho(m)^2 \rho(n)^2 \leq \\
 &\leq 144N \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \rho(m)^2 \rho(n)^2.
 \end{aligned}$$

Hence, we get

$$\frac{A_{4,N}}{N^2} \rightarrow 0, N \rightarrow \infty.$$

Making similar index changes,

$$\begin{aligned} |A_{5,N}| &\leq 192\sigma^2 N \sum_{m,n=-N}^N |\rho(m)\rho(n)\rho(n-m)| \leq \\ &\leq 192\sigma^2 N \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \rho(m)\rho(n)\rho(n-m); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |A_{8,N}| &\leq 48N \sum_{m,n,l=-N}^N \rho(m)\rho(n)\rho(l)\rho(m+n+l) \leq \\ &\leq 48N \sum_{m,n,l=-\infty}^{\infty} \rho(m)\rho(n)\rho(l)\rho(m+n+l), \end{aligned}$$

therefore,

$$\frac{A_{5,N}}{N^2} \rightarrow 0, \quad \frac{A_{8,N}}{N^2} \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty.$$

Further,

$$\begin{aligned} A_{6,N} &= 24\sigma^4 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_2 - i_3)^2 = \\ &= 24\sigma^4 (N-2) \sum_{i_2 \neq i_3} \rho(i_2 - i_3)^2 = \\ &= 48\sigma^4 (N-2) \sum_{m=1}^{N-1} (N-m)\rho(m)^2. \end{aligned}$$

Therefore,

$$\begin{aligned} \frac{A_{6,N}}{N^2} &= 96\sigma^4 \left(1 - \frac{2}{N}\right) \sum_{m=1}^{N-1} \left(1 - \frac{m}{N}\right) \rho(m)^2 \rightarrow \\ &\rightarrow 48\sigma^4 \sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2, N \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Finally, let us deal with $A_{7,N}$:

$$\begin{aligned} A_{7,N} &= 12 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3 \neq i_4} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 = \\ &= 12 \sum_{i_1 \neq i_2, i_3 \neq i_4, \{i_1, i_2\} \neq \{i_3, i_4\}} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 - \\ &\quad - 12 \cdot 4 \sum_{i_1 \neq i_2 \neq i_3} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2. \end{aligned}$$

Now

$$\sum_{\substack{i_1 \neq i_2, i_3 \neq i_4 \\ \{i_1, i_2\} \neq \{i_3, i_4\}}} \rho(i_1 - i_2)^2 \rho(i_3 - i_4)^2 =$$

$$\begin{aligned} &= \left(\sum_{i_1 \neq i_2} \rho(i_1 - i_2)^2 \right)^2 - \sum_{i_1 \neq i_2} \rho(i_1 - i_2)^4 = \\ &= \left(2 \sum_{m=1}^{N-1} (N-m)\rho(m)^2 \right)^2 - \frac{A_{2,N}}{72}. \end{aligned}$$

Therefore,

$$A_{7,N} = 48 \left(\sum_{m=1}^{N-1} (N-m)\rho(m)^2 \right)^2 - \frac{A_{2,N}}{6} - \frac{A_{4,N}}{3},$$

hence

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{A_{7,N}}{N^2} &= 48 \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{m=1}^{N-1} \left(1 - \frac{m}{N}\right) \rho(m)^2 \right)^2 = \\ &= 48 \left(\sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2 \right)^2. \end{aligned}$$

Collecting everything,

$$\begin{aligned} \frac{E(V_N - EV_N)^4}{N^2} &\rightarrow 12\sigma^8 + 48\sigma^4 \sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2 + \\ &\quad + 48 \left(\sum_{m=1}^{\infty} \rho(m)^2 \right)^2 = \\ &= 12 \left(\sum_{m=-\infty}^{\infty} \rho(m)^2 \right)^2, N \rightarrow \infty. \quad \square \end{aligned}$$

Theorem 3.2. $\hat{\sigma}^2$ is an asymptotically normal estimator of σ^2 with asymptotic variance $2 \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho(i)^2$.

Proof. From Lemmas 1, 2 it follows that

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E(V_N - EV_N)^4}{D(V_N)^2} &= \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\frac{E(V_N - EV_N)^4}{N^2}}{\left(\frac{D(V_N)}{N}\right)^2} = \\ &= \frac{12 \left(\sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho(i)^2\right)^2}{\left(2 \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho(i)^2\right)^2} = 3. \end{aligned}$$

So we get the statement as a conclusion of the Fourth moment theorem. □

Список використаних джерел

1. John B. Walsh, *An introduction to stochastic partial differential equations*, Springer, Berlin (1986).
2. Ciprian A. Tudor, *Analysis of Variations for Self-similar Processes*, Springer, Cham (2013).
3. M.Taylor, *Random Fields: Stationarity, Ergodicity, and Spectral Behavior*, <http://www.unc.edu/math/Faculty/met/rndfcn.pdf>.
4. D. Nualart, G. Peccati, *Central limit theorems for sequences of multiple stochastic integrals*, The Annals of Probability, (2005), 177-193.
5. J. Pospisil, R. Tribe, *Parameter Estimates and Exact Variations for Stochastic Heat Equations Driven by Space-Time White Noise*, Stochastic Analysis and Applications(2014),593-611.
6. L.Isserlis, *On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables*, Biometrika (1918),134-139.

References

1. JOHN B. WALSH,(1986) *An introduction to stochastic partial differential equations*, Springer, Berlin.
2. CIPRIAN A. TUDOR,(2013) *Analysis of Variations for Self-similar Processes*, Springer, Cham.
3. M.TAYLOR, *Random Fields: Stationarity, Ergodicity, and Spectral Behavior*, <http://www.unc.edu/math/Faculty/met/rndfcn.pdf>.
4. D. NUALART, G. PECCATI, (2005) *Central limit theorems for sequences of multiple stochastic integrals*, The Annals of Probability, 177-193.
5. J. POSPISIL, R. TRIBE, (2014) *Parameter Estimates and Exact Variations for Stochastic Heat Equations Driven by Space-Time White Noise*, Stochastic Analysis and Applications,593-611.
6. L.ISSERLIS, (1918) *On a formula for the product-moment coefficient of any order of a normal frequency distribution in any number of variables*, Biometrika ,134-139.

Received: 04.01.2018

УДК 519.21

О.В. Іванов ¹, *д.ф.-м.н., проф.*
Н.В. Каптур ², *студ.*
І.М. Савич ³, *к.ф.-м.н.*

Консистентність оцінок Коенкера-Бассетта в лінійній моделі регресії

^{1,2,3} Національний технічний університет
України "Київський політехнічний інститут
імені Ігоря Сікорського", 03056, Київ-56,
просп. Перемоги, 37
e-mail: ¹alexntuu@gmail.com,
²vasylivna.nv@gmail.com
³sim_ka@i.ua

O.V. Ivanov ¹, *Dr. Sci., Prof.*
N.V. Kaptur ², *stud.*
I.M. Savych ³, *Ph.D.*

Consistency of Koenker-Bassett estimators in linear regression model

^{1,2,3}National Technical University of Ukraine
"Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", 03056,
Kyiv, 37 Peremogy prospect
e-mail: ¹alexntuu@gmail.com,
²vasylivna.nv@gmail.com
³sim_ka@i.ua

У роботі вивчається асимптотична поведінка оцінок Коенкера - Бассетта параметрів лінійної моделі регресії з дискретним часом спостереження та випадковим шумом, який є нелінійним локальним перетворенням гауссівського стаціонарного часового ряду з сингулярним спектром. Мета роботи полягає в отриманні вимог до функції регресії та часового ряду, що моделює випадковий шум, за яких оцінки Коенкера - Бассетта параметрів функції регресії є консистентними.

Ключові слова: лінійна модель регресії, функція регресії, локальне перетворення гауссівського стаціонарного часового ряду, оцінка Коенкера - Бассетта, консистентність.

Asymptotic properties of Koenker - Bassett estimators of linear regression model parameters with discrete observation time and random noise being nonlinear local transformation of Gaussian stationary time series with singular spectrum are studied. The goal of the work lies in obtaining the requirements to regression function and time series that simulates the random noise, under which the Koenker - Bassett estimators of regression model parameters are consistent. Linear regression model with discrete observation time and bounded open convex parametric set is the object of the studying. For the first time in linear regression model with described stationary time series as noise having singular spectrum, the weak consistency of unknown parameters Koenker - Bassett estimators are obtained. For getting these results complicated concepts of time series theory and time series statistics have been used, namely: local transformation of Gaussian stationary time series, stationary time series with singular spectral density, expansions by Chebyshev - Hermite polynomials of the transformed Gaussian time series values.

Key Words: linear regression model, regression function, local transformation of Gaussian stationary time series, Koenker - Bassett estimators, consistency.

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Вступ

Задача оцінювання невідомих параметрів сигналу у моделях спостережень «сигнал плюс шум» є важливою проблемою статистики випадкових процесів. У роботі розглядається лінійна модель регресії з дискретним часом спостереження, яка є складною в тому розумінні, що випадковий шум є локальним нелінійним перетворенням стаціонарного гауссівського часового ряду з сингулярною спектральною щільністю (зокрема, ця щільність може відповіда-

ти сильно залежному часовому ряду). Вивчення часових рядів з несумовними коваріаційними функціями породжує складні ймовірнісні та статистичні задачі.

В сучасній теорії статистичного оцінювання чільне місце займають оцінки квантильної регресії, або оцінки Коенкера-Бассетта [1], що визначаються за допомогою несиметричної функції втрат та є оцінками невідомого параметра — квантиля спостережень.

Асимптотичні властивості оцінок

Коенкера-Бассетта у випадку нелінійних моделей регресії з неперервним часом та шумом, що є локальним перетворенням гауссівського стаціонарного сильно залежного випадкового процесу, досліджувалися раніше. Зокрема, у статті І.М. Савич [2] доведено слабку консистентність, а у роботах О.В. Іванова, І.М. Савич [3, 4] задачу про знаходження асимптотичного розподілу нормованих оцінок Коенкера-Бассетта зведено до простішої задачі знаходження асимптотичного розподілу одного інтегралу від породженого випадковим шумом індикаторного процесу, зваженого градієнтом функції регресії та отримано асимптотичний розподіл нормованих оцінок.

2 Постановка задачі

Розглянемо модель регресії

$$X_j = g(j, \theta) + \varepsilon_j, \quad j \in \overline{1, N}, \quad (1)$$

де $g(j, \theta) = \sum_{i=1}^q \theta_i g_i(j)$, $j \geq 1$, $\theta = (\theta_1, \dots, \theta_q) \subset \Theta \subset \mathbb{R}^q$, Θ – відкрита опукла обмежена множина. Відносно похибок спостережень ε_j припустимо наступне.

A1. ε_j , $j \in \mathbb{Z}$, локальне перетворення гауссівського стаціонарного часового ряду ξ_j , $j \in \mathbb{Z}$, а саме: $\varepsilon_j = G(\xi_j)$, $G(x)$, $x \in \mathbb{R}$, – борелева функція така, що $E\varepsilon_0 = 0$, $E\varepsilon_0^2 < \infty$.

A2. Часовий ряд ξ_j , $j \in \mathbb{Z}$, визначено на ймовірносному просторі (Ω, \mathcal{F}, P) , $E\xi_0 = 0$, а його коваріаційну функцію задано виразом

$$B(j) = E\xi_j \xi_0 = \sum_{l=0}^r A_l B_{\alpha_l, \chi_l}(j), \quad j \in \mathbb{Z}, \quad r \geq 0, \quad (2)$$

причому $A_l > 0$, $\sum_{l=0}^r A_l = 1$,

$$B_{\alpha_l, \chi_l}(j) = \frac{\cos(\chi_l j)}{(1+j^2)^{\alpha_l/2}}, \quad \alpha_l \in (0, 1), \quad l = \overline{0, r},$$

$$0 \leq \chi_0 < \chi_1 < \dots < \chi_r < \pi.$$

Якщо $\chi_0 = 0$, то часовий ряд ξ_j , $j \in \mathbb{Z}$, є сильно залежним. Позначимо $F(x)$, $x \in \mathbb{R}$, функцію розподілу випадкової величини ε_0 .

A3. $F(0) = \beta$, $\beta \in (0, 1)$.

Введемо функцію втрат

$$\rho_\beta(x) = \begin{cases} \beta x, & x \geq 0, \\ (\beta - 1)x, & x < 0. \end{cases} \quad (3)$$

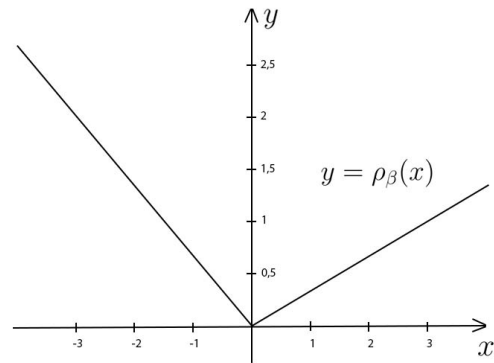


Рис. 1. Графік функції $y = \rho_{1/3}(x)$.

Означення 1. Квантильною оцінкою, або оцінкою Коенкера-Бассетта, параметра $\theta \in \Theta$, отриманою за спостереженнями (1), називається будь-який випадковий вектор $\hat{\theta}_N = \hat{\theta}_N(X_j, j = \overline{1, N}) \in \Theta^c$ такий, що

$$Q_N(\hat{\theta}_N) = \min_{\tau \in \Theta^c} Q_N(\tau),$$

$$Q_N(\tau) = \sum_{j=1}^N \rho_\beta(X_j - g(j, \tau)),$$

Θ^c – замикання множини Θ .

За введених умов оцінка $\hat{\theta}_N$ існує [5].

У моделі квантильної регресії рівня β спостереження можна записати у вигляді суми квантильної функції регресії та «похибок» спостережень, про функцію розподілу F яких відомо, що $F(0) = \beta$. У роботі зроблено спрощуюче припущення про рівність нулю математичного сподівання похибок спостережень. Це звужує ідею квантильної регресії, але надає можливість розглядати звичайні моделі регресії з несиметричними похибками спостережень і отримувати робастні оцінки Коенкера-Бассетта параметрів регресії, використовуючи дану функцію втрат. Зауважимо також, що оцінки Коенкера-Бассетта узагальнює оцінку найменших модулів у тому розумінні, що оцінка найменших модулів є оцінкою невідомого параметра медіани різнорозподілених спостережень.

Позначимо

$$d_N^2 = \text{diag} \left(d_{iN}^2 \right)_{i=1}^q, \quad d_{iN}^2 = \sum_{j=1}^N g_i^2(j), \quad (4)$$

та припустимо, що є вірними наступні нерівності.

$$\mathbf{B1(i)} \quad 0 < \underline{c}_i \leq \liminf_{N \rightarrow \infty} N^{-1/2} d_{iN} \leq \limsup_{N \rightarrow \infty} N^{-1/2} d_{iN} \leq \overline{c}_i < \infty, \quad i = \overline{1, q}.$$

Зробимо заміну змінних у функції регресії $u = N^{-1/2} d_N(\tau - \theta)$ та покладемо $h(j, u) = g(j, \theta + N^{1/2} d_N^{-1} u)$. Тоді множина Θ трансформується в множину $\overline{U}_N(\theta) = N^{-1/2} d_N(\Theta - \theta)$, а оцінка $\hat{\theta}_N$ – в оцінку $\overline{u}_N = N^{-1/2} d_N(\Theta - \theta)$.

Запишемо

$$Q_N^*(u) = Q_N(\theta + N^{1/2} d_N^{-1} u), \quad u \in \overline{U}_N^c(\theta);$$

$$V(r) = \{u \in \mathbb{R}^q : \|u\| < r\}, \quad r > 0;$$

$$\Phi_{kN}(u_1, u_2) = \sum_{j=1}^N |h(j, u_1) - h(j, u_2)|^k, \quad k = 1, 2;$$

$$\varepsilon_j = \varepsilon_j^+ + \varepsilon_j^-, \quad \varepsilon_j^+ = \varepsilon_j \chi\{\varepsilon_j \leq 0\}, \quad \varepsilon_j^- = \varepsilon_j \chi\{\varepsilon_j < 0\};$$

$$I(N) = \left(I_{ik}(N) \right)_{i,k=1}^q, \quad I_{ik}(N) = N^{-1} \sum_{j=1}^N g_i(j) g_k(j).$$

Позначимо $\lambda_{\min}(I(N))$ – найменше власне число матриці $I(N)$.

B1(ii). Для достатньо великих $N(N > N_0)$

$$\lambda_{\min}(I(N)) \geq \underline{\lambda} > 0. \quad (5)$$

Отримаємо з умов **B1(i)** та **B1(ii)** корисні для нас нерівності. Для будь-якого достатньо малого $\varepsilon > 0$ та $N > N_0$ справджується $N^{-1/2} d_{iN} \geq \underline{c}_i - \varepsilon$, звідки

$$N^{1/2} d_{iN}^{-1} \leq \frac{1}{\underline{c}_i - \varepsilon} \leq \max_{1 \leq i \leq q} \left(\frac{1}{\underline{c}_i - \varepsilon} \right) = \frac{1}{\min \underline{c}_i - \varepsilon}, \quad i = \overline{1, q}. \quad (6)$$

З іншого боку, $N^{-1/2} d_{iN} \leq \overline{c}_i + \varepsilon$, звідки

$$N^{1/2} d_{iN}^{-1} \geq \frac{1}{\overline{c}_i + \varepsilon} \geq \min_{1 \leq i \leq q} \left(\frac{1}{\overline{c}_i + \varepsilon} \right) = \frac{1}{\max \overline{c}_i + \varepsilon}, \quad i = \overline{1, q}. \quad (7)$$

Оцінимо величину

$$N^{-1} \Phi_{2N}(u_1, u_2) = \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^q g_i(j) N^{1/2} d_{iN}^{-1} (u_1^i - u_2^i) \right)^2 \leq \left(\sum_{i=1}^q |u_1^i - u_2^i| \right)^2 \leq q \|u_1 - u_2\|^2, \quad (8)$$

Тоді

$$\sup_{u \in V^c(r)} N^{-1} \Phi_{2N}(u, 0) \leq q r^2. \quad (9)$$

Крім цього,

$$\sup_{\|u_1 - u_2\| \leq \delta} N^{-1} \Phi_{1N}(u_1, u_2) \leq \sup_{\|u_1 - u_2\| < \delta} \left(N^{-1} \Phi_{2N}(u_1, u_2) \right)^{1/2} \leq q^{1/2} \delta. \quad (10)$$

Маємо також за (5) для $N > N_0$

$$N^{-1} \Phi_{2N}(u, 0) = \sum_{i,k=1}^q \left(N^{-1} \sum_{j=1}^N g_i(j) g_k(j) (N^{1/2} d_{iN}^{-1} u_i) \times (N^{1/2} d_{kN}^{-1} u_k) \right) \geq \underline{\lambda} \|N^{1/2} d_N^{-1} u\|^2 \geq \underline{\lambda} (\max \overline{c}_i + \varepsilon)^{-2} \|u\|^2. \quad (11)$$

Таким чином, для довільно малого $r > 0$, для $N > N_0$ існує таке $\nu(r) > 0$, що

$$\inf_{\|u\| > r} N^{-1} \Phi_{2N}(u, 0) \geq \nu(r). \quad (12)$$

У якості $\nu(r)$ можна, наприклад, взяти величину

$$\nu(r) = \underline{\lambda} (2 \max \overline{c}_i)^{-2} r^2. \quad (13)$$

Сформулюємо властивості функції втрат ρ_β , деякі з яких будуть використані в подальшому тексті [2].

I. $\rho_\beta(ax) = a \rho_\beta(x)$, $a \geq 0$;

II. $\rho_\beta(x) + \rho_\beta(-x) = |x|$;

III. $\underline{\beta}|x| \leq \rho_\beta(x) \leq \overline{\beta}|x|$,
де $\underline{\beta} = \beta \wedge (1 - \beta)$, $\overline{\beta} = \beta \vee (1 - \beta)$;

IV. $\rho_\beta(x + y) \leq \rho_\beta(x) + \rho_\beta(y)$;

V. $|\rho_\beta(x) - \rho_\beta(y)| \leq \rho_\beta(x - y) \vee \rho_\beta(y - x) \leq \underline{\beta}|x - y|$;

VI. Якщо $E|\xi| < \infty$, то $E\rho_\beta(\xi) = E\rho_{1-\beta}(-\xi)$;

VII. Якщо $E\xi^2 < \infty$, то $D\rho_\beta(\xi) = D\rho_{1-\beta}(-\xi)$.

Оскільки $E\rho_\beta(\xi) = \beta E\xi^+ + (\beta - 1)E\xi^-$, то у випадку, коли $E\xi = E\xi^+ + E\xi^- = 0$, маємо $E\rho_\beta(\xi) = E\xi^+$. Зокрема, $E\rho_\beta(\varepsilon_0) = E\varepsilon_0^+$.

Наступна умова є умовою контрасту, тобто умовою розрізняння параметрів.

C1. Для довільного $r > 0$ існує $\Delta(r) > 0$ таке, що для $N > N_0$

$$\inf_{u \in \overline{U}_N^c(\theta) \setminus V^c(r)} N^{-1} E Q_N^*(u) \geq E\varepsilon_0^+ + \Delta(r), \quad (14)$$

3 Основний результат

Нехай $\alpha = \min_{0 \leq l \leq r} \alpha_l$, де α_l – константи з умови **A2**.

Теорема 1. *За умов **A1** – **A3**, **B1(i)** та **C1** для довільного $r > 0$*

$$P\left\{\|\bar{u}_N\| \geq r\right\} = O(N^{-\alpha}) \text{ при } N \rightarrow \infty. \quad (15)$$

Доведення. Позначимо

$$\delta(u) = Q_N^*(u) - EQ_N^*(u).$$

Тоді $\delta_N(0) = Q_N^*(0) - EQ_N^*(0) = Q_N(\theta) - EQ_N(\theta) = \sum_{j=1}^N \rho_\beta(\varepsilon_j) - NE\varepsilon_0^+$. Перепишучи означення ОКБ для нормованої оцінки \bar{u}_N , отримуємо

$$Q_N^*(\bar{u}_N) = \min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta)} Q_N^*(u),$$

$$Q_N^*(u) = \sum_{j=1}^N \rho_\beta(X_j - h(j, u)),$$

$$Q_N^*(\bar{u}_N) \leq Q_N^*(0) = \delta_N(0) + NE\varepsilon_0^+ \text{ м. н.}$$

З використанням умови **C1** для $\gamma \in (0, 1)$ маємо

$$\begin{aligned} & P\left\{\|\bar{u}_N\| \geq r\right\} = \\ & P\left\{\|\bar{u}_N\| \geq r\right\} \cap \left\{Q_N^*(\bar{u}_N) \leq \delta_N(0) + NE\varepsilon_0^+\right\} \leq \\ & P\left\{\min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}Q_N^*(u) \leq N^{-1}\delta_N(0) + E\varepsilon_0^+\right\} \leq \\ & P\left\{\min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}Q_N^*(u) \leq N^{-1}\delta_N(0) + \right. \\ & \left. + \min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}EQ_N^*(u) - \Delta(r)\right\} \leq \\ & P\left\{N^{-1}\delta_N(0) \geq (1 - \gamma)\Delta(r)\right\} \\ & + P\left\{\min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}Q_N^*(u) - \right. \\ & \left. - \min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}EQ_N^*(u) \leq -\gamma\Delta(r)\right\} \\ & = P_1 + P_2. \end{aligned} \quad (16)$$

Зауважимо, що

$$\begin{aligned} P_2 & \leq P\left\{\min_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}\delta_N(u) \leq -\gamma\Delta(r)\right\} \leq \\ & \leq P\left\{\max_{u \in \bar{U}_N^c(\theta) \setminus V(r)} N^{-1}|\delta_N(u)| \geq \gamma\Delta(r)\right\}. \end{aligned} \quad (17)$$

Завдяки умові **B1(i)** та обмеженості Θ , всі множини $\bar{U}_N^c(\theta)$ при $N > N_0$ потрапляють в деяку кулю $V(r_0)$ для деякого $r_0 > r$, тобто нерівність (17) можна продовжити наступним чином:

$$\begin{aligned} P_2 & \leq P\left\{\max_{u \in V^c(r_0) \setminus V^c(r)} N^{-1}|\delta_N(u)| \geq \gamma\Delta(r)\right\} \leq \\ & \leq P\left\{\max_{u \in V^c(r_0)} N^{-1}|\delta_N(u)| \geq \gamma\Delta(r)\right\}. \end{aligned} \quad (18)$$

Оцінимо спочатку ймовірність P_1 . За нерівністю Чебишова

$$\begin{aligned} P_1 & \leq \frac{N^{-2}E\delta_N^2(0)}{(1 - \gamma)^2 \Delta^2(r)}, \\ N^{-2}E\delta_N^2(0) & = N^{-2}\left(\sum_{j=1}^N \rho_\beta(\varepsilon_j) - NE\varepsilon_0^+\right)^2 = \\ & = N^{-2}\sum_{j,k=1}^N E\rho_\beta(\varepsilon_j)\rho_\beta(\varepsilon_k) - (NE\varepsilon_0^+)^2. \end{aligned} \quad (19)$$

За властивістю III функції втрат ρ_β

$$E\rho_\beta^2(\varepsilon_0) \leq \bar{\beta}^2 E\varepsilon_0^2 = \varkappa_1 < \infty.$$

Тоді в гільбертовому просторі $L_2(\mathbb{R}, \varphi(x)dx)$, де $\varphi(x) = (2\pi)^{-1/2}e^{-x^2/2}$ – стандартна гауссівська щільність, є вірним розклад

$$\begin{aligned} \rho_\beta(G(x)) & = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m}{m!} H_m(x), \\ c_m & = \int_{\mathbb{R}} \rho_\beta(G(x)) H_m(x) \varphi(x) dx, \quad m \geq 0, \end{aligned}$$

за поліномами Чебишова – Ерміта

$$H_m(x) = (-1)^m e^{x^2/2} \frac{d^m}{dx^m} e^{-x^2/2}, \quad m \geq 0,$$

причому $EH_m(\xi_j)H_n(\xi_k) = \delta_m^n m! B^m(j - k)$, δ_m^n – символ Кронекера, тобто $\delta_m^n = 1$ при $m = n$ та $\delta_m^n = 0$, якщо $m \neq n$. З цього випливає, що

$$E\rho_\beta(\varepsilon_j)\rho_\beta(\varepsilon_k) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m^2}{m!} B^m(j - k), \quad (20)$$

зокрема,

$$E\rho_\beta^2(\varepsilon_0) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m^2}{m!} \leq \varkappa_1.$$

Зауважимо, що $E\rho_\beta(\varepsilon_0) = \varepsilon_0^+ = c_0$, та з (19), (20) маємо

$$\begin{aligned} N^{-2}E\delta_N^2(0) &= \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m^2}{m!} B^m(j-k) - (E\varepsilon_0^+)^2 \right) &= \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{c_m^2}{m!} B^m(j-k) \right) &\leq \\ \varkappa_1 N^{-2} \sum_{j,k=1}^N |B(j-k)|. \end{aligned}$$

Оцінимо останню подвійну суму:

$$\begin{aligned} N^{-2} \sum_{j,k=1}^N |B(j-k)| &= \\ N^{-2} \sum_{s=-(N-1)}^{N-1} (N-|s|)|B(s)| &= \\ N^{-1} \sum_{s=-(N-1)}^{N-1} \left(1 - \frac{|s|}{N}\right) |B(s)| &\leq 2N^{-1} \sum_{s=0}^N |B(s)|. \end{aligned}$$

З іншого боку, при $s \neq 0$ за нашими умовами

$$|B(s)| \leq \sum_{l=0}^r A_l (1+s)^{-\alpha_l/2} \leq (1+s^2)^{-\alpha/2} \leq s^{-\alpha}.$$

Таким чином,

$$\begin{aligned} 2N^{-1} \sum_{s=0}^N |B(s)| &= 2N^{-1} + 2N^{-1} \sum_{s=1}^N |B(s)| \leq \\ 2N^{-1} + 2N^{-1} \sum_{s=1}^N s^{-\alpha} &\leq 2N^{-1} + 2N^{-1} \int_0^N s^{-\alpha} ds = \\ 2N^{-1} + 2(1-\alpha)^{-1} N^{-\alpha}. \end{aligned}$$

Отже, при $N \rightarrow \infty$

$$P_1 \leq \frac{2\varkappa_1}{(1-\gamma)^2 \Delta^2(r)} \left(N^{-1} + (1-\alpha)^{-1} N^{-\alpha} \right) = O(N^{-\alpha}). \quad (21)$$

Оцінимо тепер імовірність P_2 , користуючись нерівністю (18). Нехай $F^{(1)}, \dots, F^{(L)} \subset V^c(r_0)$ – замкнені множини, діаметри яких не перевищують значення $\delta > 0$, яке ми оберемо нижче, причому

$$\bigcup_{i=1}^L F^{(i)} = V^c(r_0).$$

Зафіксуємо точки $u_i \in F^{(i)}$, $i = \overline{1, L}$. Тоді

$$\begin{aligned} P_2 &\leq P \left\{ \sup_{u \in \bigcup_{i=1}^L F^{(i)}} N^{-1} |\delta_N(u)| \geq \gamma \Delta(r) \right\} \leq \\ &\sum_{i=1}^L P \left\{ \sup_{u', u'' \in F^{(i)}} N^{-1} |\delta_N(u') - \delta_N(u'')| + \right. \\ &\left. N^{-1} |\delta_N(u_i)| \geq \gamma \Delta(r) \right\}. \end{aligned} \quad (23)$$

За властивістю V функції втрат ρ_β отримуємо

$$\begin{aligned} |\delta_N(u') - \delta_N(u'')| &\leq \\ |Q_N^*(u') - Q_N^*(u'')| + E|Q_N^*(u') - Q_N^*(u'')| &\leq \\ \sum_{j=1}^N |\rho_\beta(X_j - h(j, u')) - \rho_\beta(X_j - h(j, u''))| + \\ E \sum_{j=1}^N |\rho_\beta(X_j - h(j, u')) - \rho_\beta(X_j - h(j, u''))| &\leq \\ 2\bar{\beta} \Phi_{1N}(u', u''). \end{aligned} \quad (24)$$

З нерівності (10) випливає, що для $u', u'' \in F^{(i)}$

$$2\bar{\beta} \Phi_{1N}(u', u'') \leq 2\bar{\beta} q^{\frac{1}{2}} \delta. \quad (25)$$

Таким чином, з (22) - (25) знаходимо, що

$$P_2 \leq \sum_{i=1}^L P \left\{ N^{-1} |\delta_N(u_i)| \geq \gamma \Delta(r) - 2\bar{\beta} q^{\frac{1}{2}} \delta \right\}. \quad (26)$$

Оберемо величину $\delta > 0$ таким чином, щоб виконувалась наступна нерівність $\gamma \Delta(r) - 2\bar{\beta} q^{\frac{1}{2}} \delta := \varepsilon(r, \delta) > 0$ (зменшення δ призведе лише до зростання числа L), і оцінимо кожний доданок суми (26) окремо.

Маємо за нерівністю Чебишова

$$P \left\{ N^{-1} |\delta_N(u_i)| \geq \varepsilon(r, \delta) \right\} \leq \varepsilon^{-2}(r, \delta) N^{-2} E \delta_N^2(u_i). \quad (27)$$

Позначимо

$$\Delta h(j, u_i) = h(j, u_i) - h(j, 0)$$

і запишемо

$$\begin{aligned} \delta_N(u_i) &= Q_N^*(u_i) - E Q_N^*(u_i) = \\ \sum_{j=1}^N \rho_\beta(\varepsilon_j - \Delta h(j, u_i)) - E \sum_{j=1}^N \rho_\beta(\varepsilon_j - \Delta h(j, u_i)), \end{aligned}$$

$$E\delta_N^2(u_i) = \sum_{j,k=1}^N E\rho_\beta(\varepsilon_j - \Delta h(j, u_i)) \times$$

$$\rho_\beta(\varepsilon_k - \Delta h(k, u_i)) - \left(E \sum_{j=1}^N \rho_\beta(\varepsilon_j - \Delta h(j, u_i)) \right)^2.$$

Покладемо

$$\rho_\beta(\varepsilon_j - \Delta h(j, u_i)) = Z(\varepsilon_j, j) = Z(G(\xi_j), j). \quad (28)$$

Оскільки для будь-якого $j = \overline{1, N}$ за властивістю III функції ρ_β

$$EZ^2(\varepsilon_0, j) = E\rho_\beta^2(\varepsilon_0 - \Delta h(j, u_i)) \leq \bar{\beta}^2 (E\varepsilon_0^2 + (\Delta h(j, u_i))^2) < \infty, \quad (29)$$

то функцію $Z(G(\cdot), j)$ можна розкласти в ряд у просторі $L_2(\mathbb{R}, \varphi(x)dx)$ за поліномами Чебишова – Ерміта:

$$Z(G(x), j) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m(j, u_i)}{m!} H_m(x),$$

$$c_0(j, u_i) = EZ(\varepsilon_0, j),$$

$$c_m(j, u_i) = \int_{\mathbb{R}} \rho_\beta(G(x) - \Delta h(j, u_i)) H_m(x) \varphi(x) dx,$$

$m \geq 1$.

Тоді користуючись попередніми міркуваннями, які дозволили отримати оцінку (21), та нерівністю (29), маємо при $N \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} N^{-2} E\delta_N^2(u_i) &= \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \left(\sum_{m=0}^{\infty} \frac{c_m(j, u_i) c_m(k, u_i)}{m!} B^m(j-k) - \right. \\ &c_0(j, u_i) c_0(k, u_i) \left. \right) = \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{c_m(j, u_i) c_m(k, u_i)}{m!} B^m(j-k) \right) &\leq \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \left(\sum_{m=1}^{\infty} \frac{c_m^2(j, u_i)}{m!} |B(j-k)| \right) &\leq \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N EZ^2(\varepsilon_0, j) |B(j-k)| &\leq \\ N^{-2} \sum_{j,k=1}^N \bar{\beta}^2 (E\varepsilon_0^2 + (\Delta h(j, u_i))^2) |B(j-k)| &= \\ O(N^{-\alpha}) + \bar{\beta}^2 N^{-2} \sum_{j,k=1}^N (\Delta h(j, u_i))^2 |B(j-k)|. & \end{aligned} \quad (30)$$

Оцінимо останню суму, скориставшись нерівністю (9):

$$\begin{aligned} N^{-2} \sum_{j,k=1}^N (\Delta h(j, u_i))^2 |B(j-k)| &= \\ N^{-1} \sum_{j=1}^N (\Delta h(j, u_i))^2 N^{-1} \sum_{k=1}^N |B(j-k)| &\leq \\ N^{-1} \Phi_{2N}(u_i, 0) N^{-1} \sum_{s=-(N-1)}^{N-1} |B(s)| &\leq \\ 2qr_0^2 N^{-1} \sum_{s=0}^N |B(s)| = O(N^{-\alpha}) & \end{aligned} \quad (31)$$

при $N \rightarrow \infty$. З (26), (27), (30) та (31) отримуємо, що $P_2 = O(N^{-\alpha})$. \square

Зауважимо, що за умови **B2(i)** справедливість для будь-якого $r > 0$ співвідношення (15) та співвідношення

$$P\{|\hat{\theta}_N - \theta| \geq r\} = O(N^{-\alpha}) \text{ при } N \rightarrow \infty \quad (32)$$

впливає одне з одного. Щоб впевнитись в цьому майже очевидному твердженні, скористаємось міркуваннями, які привели до нерівностей (6) та (7).

Нехай справедливе (15). Тоді маємо для довільного $r > 0$

$$\begin{aligned} P\{|\hat{\theta}_N - \theta| \geq r\} &= \\ P\{|N^{-1/2} d_N^{-1} (N^{-1/2} d_N (\hat{\theta}_N - \theta))| \geq r\} &\leq \\ P\{|N^{-1/2} d_N (\hat{\theta}_N - \theta)| \geq r(\min \underline{c}_i - \varepsilon)\} &= \\ O(N^{-\alpha}) \text{ при } N \rightarrow \infty, & \end{aligned}$$

якщо обрати ε достатньо малим, тобто (32) виконується.

Нехай, навпаки, має місце (32). Тоді для довільного $r > 0$

$$\begin{aligned} P\{|N^{-1/2} d_N (\hat{\theta}_N - \theta)| \geq r\} &\leq \\ P\{|\hat{\theta}_N - \theta| \geq r(\max \bar{c}_i + \varepsilon)^{-1}\} &= O(N^{-\alpha}) \end{aligned}$$

при $N \rightarrow \infty$, тобто справедливе (15).

Сформулюємо достатні умови виконання умови контрасту **C1**.

$$\mathbf{C2. (i)} \sup_{j \geq 1} \max_{\tau_1, \tau_2 \in \Theta^c} |g(j, \tau_1) - g(j, \tau_2)| = g_0 < \infty;$$

(ii) випадкова величина ε_0 має щільність $p(x) = F'(x)$, $x \in \mathbb{R}$, причому $\inf_{|x| \leq g_0} p(x) = p_0 > 0$.

У роботі [6, 7] доведено, що за умови **C2** для $g \in [0, g_0]$

$$E\rho_\beta(\varepsilon_0 \pm g) - E\rho_\beta(\varepsilon_0) \geq \frac{1}{2}p_0g^2. \quad (33)$$

З нерівності (33) випливає, що

$$N^{-1}EQ_N(\theta + N^{1/2}d_N^{-1}u) \geq E\rho_\beta(\varepsilon_0) + \frac{1}{2}p_0N^{-1}\Phi_{2N}(u, 0), \quad (34)$$

або для будь-якого $r > 0$

$$\inf_{u \in U_N^c(\theta) \setminus V^c(r)} N^{-1}EQ_N^*(u) \geq E\varepsilon_0^+ + \frac{1}{2}p_0 \inf_{\|u\| > r} \Phi_{2N}(u, 0) \geq E\varepsilon_0^+ + \frac{1}{2}p_0 \nu(r), \quad (35)$$

де $\nu(r)$ виникає в нерівності (12) і задано виразом (13). Нагадаємо, що (12) отримано за припущенням **B1(ii)**. Таким чином, ми можемо сформулювати наступний наслідок доведеної теореми, який зручніше застосовувати.

Наслідок 1. За умов **A1-A3**, **B1(i)**, **B1(ii)** та **C2** для довільного $r > 0$

$$P\{\|\hat{\theta}_N - \theta\| \geq r\} = O(N^{-\alpha}) \text{ при } N \rightarrow \infty. \quad (36)$$

Приклад 1. Розглянемо в моделі спостережень (1) функцію регресії

$$g(j, \theta) = \sum_{i=1}^n (A_i \sin \varphi_{ij} + B_i \cos \varphi_{ij}), \quad j \geq 1, \quad (37)$$

де φ_i , $i = \overline{1, n}$, – відомі частоти гармонічних коливань, причому $0 < \varphi_1 < \dots < \varphi_n < \pi$. Вектор невідомих параметрів θ – це вектор невідомих амплітуд суми гармонічних коливань (37), а саме:

$$\theta = (A_1, B_1, A_2, B_2, \dots, A_n, B_n).$$

Таким чином, в цьому прикладі $q = 2n$, і ми маємо справу з вектором - градієнтом функції регресії

$$\nabla g(j) = (\sin \varphi_1 j, \cos \varphi_1 j, \dots, \sin \varphi_n j, \cos \varphi_n j), \quad j \geq 1. \quad (38)$$

Перевіримо виконання умов теореми 1 та наслідку 1 щодо функції регресії $g(j, \theta)$. Оскільки

$$N^{-1}d_{iN}^2 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2}, \quad i = \overline{1, 2n},$$

то умову **B1(i)** виконано. Неважко зрозуміти, що з огляду на (38), $I_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathbb{I}_{2n}$, де \mathbb{I}_{2n} – одинична матриця $2n$ -го порядку, і умову **B1(ii)** також виконано. Варто зауважити, що

$$N^{-1}\Phi_{2N}(u, 0) = \left\langle I_N N^{1/2} d_N^{-1} u, N^{1/2} d_N^{-1} u \right\rangle \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \|u\|^2$$

рівномірно за $u \in V^c(r_0)$, де куля $V^c(r_0)$ містить всі множини $\overline{U}_N^c(\theta)$ (див. вище). Крім цього,

$$|g(j, \tau_1) - g(j, \tau_2)| \leq \sqrt{2n} \|\tau_1 - \tau_2\| \leq \sqrt{2n} \text{diam } \Theta,$$

і умову **C2(i)** виконано з $g_0 = \sqrt{2n} \text{diam } \Theta$. Таким чином, за умови **C2(ii)** є вірною умова **C2**.

4 Висновок

У роботі отримано посилену властивість слабкої консистентності оцінок Коенкера-Бассетта в лінійній моделі регресії з нелінійно перетвореним гауссівським стаціонарним часовим рядом з сингулярним спектром в якості випадкового шуму, а саме: в формулах (15), (36) оцінено швидкість, з якою ймовірності в лівих частинах цих співвідношень прямують до нуля. Припускається, що параметрична множина, що містить невідоме істинне значення параметра, є обмеженою відкритою опуклою множиною евклідового простору.

Сформульовано наслідок до теореми про консистентність цих оцінок, де вказано умови для перевірки складної умови контрасту. Наведено приклад гармонічної функції регресії, для якої справджуються всі умови.

Отримані результати дозволяють використовувати оцінки Коенкера-Бассетта в моделях регресії з несиметричними похибками спостережень. Природним напрямом продовження досліджень є доведення асимптотичної нормальності оцінок Коенкера-Бассетта.

Список використаних джерел

1. *Bassett G.* Regression quantile / G. Bassett, R. Koenker // *Econometrica.* – 1978. – Vol. 46. – P 33-50.
2. *Савич І.М.* Конзистентність квантильних оцінок у моделях регресії з сильно залежним шумом / І.М. Савич // *Теорія ймовір. та матем. статист.* – 2010. – 82. – С. 128-136.
3. *Ivanov A.V.* Asymptotic Properties of Koenker–Bassett Estimator in Regression Model with Long-Range Dependence / A.V. Ivanov, I.N. Savich // *Communications in Statistics: Theory and Methods.* – 2011. – 40 (19-20). – P. 3555-3568.
4. *Іванов О.В.* Про асимптотичний розподіл оцінки Коенкера–Бассета параметра регресії з сильно залежним шумом / О.В. Іванов, І.М. Савич // *Укр. мат. журнал.* – 2011. – 63(8). – С. 1030-1052.
5. *Pfanzagl J.* On the measurability and consistency of minimum contrast estimates / J. Pfanzagl // *Metrica*, 14. – 1969. – P. 249-272.
6. *Ivanov A. V.* Asymptotic Theory of Nonlinear Regression / A.V. Ivanov // *Kluwer Academic Press, Dordrecht.* – 1997. – 327 p.
7. *Орловський І. В.* Конзистентність оцінок Коенкера–Бассетта в нелінійній моделі регресії / І.В. Орловський // *Наукові вісті НТУУ "КПІ".* – 2004. – 3. – С. 144-150.

References

1. BASSETT, G., KOENKER, R. (1978) Regression quantile. *Econometrica.* – 46. – p. 33-50.
2. SAVICH, I.M. (2011) Consistency of quantile estimators in regression models with long-range dependent noise. *Theor. of Probability and Math. Statist.* – 82. – p. 129-138.
3. IVANOV, A.V., SAVICH, I.N. (2011) Asymptotic Properties of Koenker–Bassett Estimator in Regression Model with Long-Range Dependence. *Communications in Statistics: Theory and Methods.* – 40 (19-20). – p. 3555-3568.
4. IVANOV, A.V., SAVICH, I.N. (2012) On the asymptotic distribution of the Koenker–Bassett estimator for a parameter of the nonlinear model of regression with strongly dependent noise. *Ukrainian Mathematical Journal.* – 63 (8). – p. 1187-1212.
5. PFANZAGL, J. (1969) On the measurability and consistency of minimum contrast estimates. *Metrica.* – 14. – p. 249–272.
6. IVANOV, A.V. (1997) Asymptotic Theory of Nonlinear Regression. *Kluwer Academic Press, Dordrecht.* – 327 p.
7. ORLOVSKY, I. V. (2004) Consistency of Koenker-Bassett estimator in nonlinear regression model. *Naukovi visti NTUU "KPI".* – 3. – p. 144-150.

Received: 7.03.2018

УДК 519.21

В.О. Мірошніченко¹, асп.

Узагальнений метод найменших квадратів для суміші нелінійних регресій

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64.

V.O. Miroshnychenko¹, PhD stud.

Generalized least squares estimates for mixture of nonlinear regressions

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st.

Розглянуто оцінку коефіцієнтів нелінійної регресії за спостереженнями з суміші зі скінченною кількістю компонент. Концентрації компонент у суміші є різними для різних спостережень. Для побудови оцінок використовується узагальнений метод найменших квадратів.

Ключові слова: асимптотична поведінка, метод оцінюючих рівнянь, модель суміші, нелінійна регресія, мінімаксні ваги.

We consider data in which each observed subject belongs to one of different subpopulations (components). The true number of component which a subject belongs to is unknown, but the researcher knows the probabilities that a subject belongs to a given component (concentration of the component in the mixture). The concentrations are different for different observations. So the distribution of the observed data is a mixture of components' distributions with varying concentrations. A set of variables is observed for each subject. Dependence between these variables is described by a nonlinear regression model. The coefficients of this model are different for different components. An estimator is proposed for these regression coefficients estimation based on the least squares and generalized estimating equations. Consistency of this estimator is demonstrated under general assumptions. A mixture of logistic regression models with continuous response is considered as an example. It is shown that the general consistency conditions are satisfied for this model under very mild assumptions. Performance of the estimator is assessed by simulations.

Key Words: asymptotic behavior, generalized estimation equations, mixture model, non-linear regression, minimax weights

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Вступ

У даній статті розглядається задача оцінки параметрів нелінійної регресії у моделі суміші. Моделі скінченних сумішей були розвинуті у роботах [1], [2]. Існує два підходи до вивчення сумішей: параметричний і непараметричний, при чому результатів по непараметричному підходу більше. У роботі [5] застосований непараметричний підхід для побудови функцій розподілів у моделі скінченної суміші. Модель скінченної суміші використовується для опису соціологічних та медико-біологічних даних [6].

Ми розглядаємо суміш із M компонент зі змінними концентраціями. Від номера компонента залежить розподіл спостережуваних характеристик та параметри залежностей між ними. Для оцінки параметрів можна використати навантажений метод найменших квадратів. У [4] розглядається структурна модель лінійної

регресії для моделі суміші, при чому використовуються мінімаксні вагові коефіцієнти [5].

У Теоремі 1 сформульовані загальні умови консистентності цих оцінок, у теоремі 2 вони конкретизовані для випадку логістичної функції регресії. Поведінки оцінок для вибірок фіксованого обсягу досліджено на модельованих вибірках.

2 Модель суміші

Розглянемо модель суміші зі змінними концентраціями. Кожен досліджуваний об'єкт O належить одному із M класів (компонентів суміші). Номер компонента, якому належить об'єкт, позначимо $\kappa(O) \in 1, \dots, M$. Ця характеристика не спостерігається. Вектор спостережуваних змінних об'єкта O позначимо $\xi(O)$. Будемо вважати, що розподіл спостережуваних змінних для

кожного компонента описується моделлю нелінійної структурної регресії.

Отже, $\xi(O) = (Y(O), X^1(O), \dots, X^d(O))^T$, де $Y(O)$ – відгук, $X(O) = (X^1(O), \dots, X^d(O))$ – регресори у моделі.

$$Y(O) = g(X(O), b^{(\kappa(O))}) + \varepsilon(O)$$

де g – деяка відома функція $g : \chi^d \times \Theta \rightarrow R$, $b^{(\kappa)} = (b_1^{(\kappa)}, \dots, b_d^{(\kappa)})^T \in \Theta \subseteq \mathbb{R}^d$, $\kappa = 1, \dots, M$ – невідомі коефіцієнти регресії для κ -ї компоненти суміші, $\varepsilon(O)$ – випадкова похибка. Припускаємо, що $\varepsilon(O)$:

$$E[\varepsilon(O) | \kappa(O) = m] = 0, m = 1, \dots, M,$$

та $\sigma_m^2 = \text{Var}[\varepsilon(O) | \kappa(O) = m] < \infty$. (σ_m^2 невідомі).

$F_{\varepsilon, m}(A) = P(\varepsilon(O) \in A | \kappa(O) = m)$ для довільної вимірної $A \subseteq R$ – розподіл випадкової похибки.

Вектори регресорів $X(O) = (X^1(O), \dots, X^d(O))$ вважаємо випадковими з розподілом, що залежить від $\kappa(O)$. Додатково ми припускаємо, що регресори $X(O)$ та $\varepsilon(O)$ – незалежні при фіксованому $\kappa(O) = m$, $m = 1, \dots, M$. Позначимо невідому функцію розподілу спостережуваних змінних $X(O)$

$$F_{X, m}(A) = P(X(O) \in A | \kappa(O) = m)$$

для довільної вимірної $A \subseteq \mathbb{R}^d$.

Вибірка Ξ_n , що спостерігається, складається зі значень $\xi_j = (Y_j, X_j^T)^T = \xi(O_j)$, $j = 1, \dots, n$, де O_1, \dots, O_n незалежні об'єкти, які можуть належати до різних компонентів з ймовірностями $p_j^m = P(\kappa(O_j) = m)$, $m = 1, \dots, M$; $j = 1, \dots, n$. (ці ймовірності суміші відомі для кожного об'єкту)

3 Оцінки, отримані за допомогою оціночних рівнянь

Нехай далі k – фіксований номер компонента, для якого оцінюються параметри b_k . Для оцінки параметрів різних компонент використаємо мінімаксні ваги, визначені [5] і мають вигляд

$$a_{j:n}^{(k)} = \frac{1}{\det \Gamma_n} \sum_{m=1}^M (-1)^{m+k} \gamma_{km:n} p_{j,m},$$

де i – номер об'єкту у вибірці, а $\gamma_{km:n}$ – km -й мінор матриці $\Gamma_n = (\langle p_k, p_m \rangle)_{k,m=1}^M$, де $p_k = (p_{i,k})_{i=1}^n$.

Для оцінювання невідомих параметрів регресії можна природно використати навантажений метод найменших квадратів. Для цього складається функціонал МНК із доданків, що помножені на наведені раніше навантаження.

$$G_n^k(\gamma) = \sum_{j=1}^n a_{j:n}^k (Y_j - g(X_j, \gamma))^2 \rightarrow \min_{\gamma \in \Theta}$$

Оцінки параметрів регресії є розв'язком оціночного рівняння, яке отримується шляхом диференціювання узагальненого функціоналу найменших квадратів $G_n^k(b_k)$:

$$\begin{aligned} \nabla G_n^k(\gamma) &= \sum_{j=1}^n \nabla (a_{j:n}^k (Y_j - g(X_j, \gamma))^2) = \\ &= \sum_{j=1}^n (-2) a_{j:n}^k s(X_j, Y_j, \gamma) = 0 \quad (1). \end{aligned}$$

Вектор оцінок буде стаціонарною точкою функціоналу але не завжди буде точкою мінімуму. Треба додати, що в деяких випадках розв'язком рівняння (1) буде множина точок. У такому випадку як оцінку можна обрати будь-який елемент цієї множини, але ми вимагаємо, щоб оцінка була вимірною функцією від даних.

Позначимо $J_n^{(k)}(\gamma) \stackrel{\text{def}}{=} \nabla G_n^k(\gamma)$.

Означення: $\hat{b}_n^{(k)}$ – розв'язок оціночного рівняння (1), тобто така вимірна функція від даних Ξ_n , що $J_n^k(\hat{b}_n) = 0$ м.н., називається оцінкою методу найменших квадратів.

Введемо наступні позначення:

$$\Gamma = \lim_{n \rightarrow \infty} \Gamma_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n p_j^i p_j^k \right)_{i,k=1}^M$$

та

$$s(x, y, \gamma) = (y - g(x, \gamma)) \nabla g(x, \gamma)$$

Далі $X^{(m)}, Y^{(m)}, \varepsilon^{(m)}$ – випадкові величини із розподілами:

$$X^{(m)} \sim F_{X,m}, \varepsilon^{(m)} \sim F_{\varepsilon,m} - \text{незалежні,}$$

та

$$Y^{(m)} = g(X^{(m)}, b^{(m)}) + \varepsilon^{(m)}.$$

Теорема 1: Нехай виконуються такі умови:

0. $\det \Gamma \neq 0$.

1. Θ – компакт в R^d .

2. $E|\varepsilon^{(m)}|^\delta < \infty$ та $E\|X^{(m)}\|^\delta < \infty$ для деякої $\delta > 0 \forall m$.

3. $E|h(X^{(m)}, Y^{(m)})|^{1+\delta} < \infty$ для δ з умови 3, $\forall m$, де

$$h(x, y) = \sup_{\gamma \in \Theta} \|s(x, y, \gamma)\|.$$

4. $g(x, \gamma)$ та $\nabla g(x, \gamma)$ – рівностепеневно неперервні по x , та неперервні по γ .

5. $E s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma) = 0 \Leftrightarrow \gamma = b^{(k)}$.

Тоді $b_n^{(\hat{k})} \xrightarrow{P} b^{(k)}, n \rightarrow \infty$.

Доведення. Доведення консистентності послідовності оцінок спирається на наступне твердження, яке сформульоване на основі теореми 5.5 та леми 5.3 із [3]:

Твердження 1:

1. Θ – компакт в R^d .

2. $\sup_n E\|\xi_n\|^\delta < \infty$ для деякої $\delta > 0$.

3. $\sup_n E|h(\xi_n)|^{1+\delta} < \infty$ для δ з умови 3. Тут $h(\xi) = \sup_{\gamma \in \Theta} \|s(\xi, \gamma)\|$.

4. $s(\xi, \gamma)$ – рівностепеневно неперервна по ξ .

5. $\lim_{n \rightarrow \infty} E n^{-1} S_n(\gamma) = 0 \Leftrightarrow \gamma = b^{(k)}$, де $S_n(\gamma) = \sum_{j=1}^n \psi(\xi_j, \gamma)$, та $\psi(x, \gamma)$ – оцінююча функція.

Тоді $\hat{b}_n^{(k)} \xrightarrow{P} b^{(k)}, n \rightarrow \infty$.

Перевіримо виконання умов наведеного твердження.

Позначимо $\Delta_n^{(k)}(\gamma) = E_{F_{X,k}} \frac{1}{n} J_n^{(k)}(\gamma)$. Покажемо, що виконується умова 5) твердження 1:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Delta_n^{(k)}(\gamma) = 0 \Leftrightarrow \gamma = b^{(k)}.$$

Покажемо, що $\Delta_n^{(k)}(\gamma) = -2E s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma)$. Дійсно,

$$\begin{aligned} \Delta_n^{(k)}(\gamma) &= E \sum_{s=1}^M \sum_{i=1}^n (-2n^{-1} a_{i:n}^s p_i^s) (g(X_i, b_s) - g(X_i, \gamma)) \nabla g(X_i, \gamma) = \\ &= \sum_{s \neq k} \sum_{i=1}^n (-2n^{-1} a_{i:n}^s p_i^s) E(g(X_i, b_s) - g(X_i, \gamma)) \nabla g(X_i, \gamma) + \\ &\quad \sum_{i=1}^n (-2n^{-1} a_{i:n}^k p_i^k) E_{F_{X,k}} (g(X_i, b_k) - g(X_i, \gamma)) \nabla g(X_i, \gamma) \quad (2) \end{aligned}$$

Позначимо:

$$C_s(\gamma) = -2E_{F_{X,k}} (g(X_i, b_k) - g(X_i, \gamma)) \nabla g(X_i, \gamma).$$

З урахуванням [5] незміщеності коефіцієнтів $a_{j:n}^k$: $\sum_{j=1}^n a_{j:n}^k p_j^k = n I_{k=t}$, вираз (2) спрощується:

$$\begin{aligned} \Delta_n^{(k)}(\gamma) &= \sum_{s \neq k} \sum_{i=1}^n (n^{-1} a_{i:n}^s p_i^s) C_s(\gamma) + \\ &\quad \sum_{i=1}^n (n^{-1} a_{i:n}^k p_i^k) C_k(\gamma) = \\ &\quad \sum_{s \neq k} C_s(\gamma) I_{s=k} + C_k(\gamma) = C_k(\gamma) \end{aligned}$$

З умови 5 матимемо, що $\Delta_n^{(k)}(\gamma) = -2E_{F_{X,k}} s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma) \rightarrow 0, n \rightarrow \infty \Leftrightarrow \gamma = b^{(k)}$.

Далі перевіримо умову 4 твердження 1. Покажемо що відображення $(y - g(x, \gamma)) \nabla g(x, \gamma)$ є рівностепеневно неперервним. Дійсно, оскільки g та всі її похідні обмежені і неперервні, то і функції $(\nabla((y - g(x, \gamma)) \nabla g(x, \gamma)))_{(s,d)}$; $s = 1, \dots, D$; $d = 1, \dots, D$ будуть обмежені функціями

$$C|1 + y||x_{(s)} x_{(d)}|; d = 1, \dots, D; s = 1, \dots, D;$$

тут C – деяка константа.

Тому $(y - g(x, \gamma)) \nabla g(x, \gamma)$ – рівностепеневно неперервна.

Бачимо, що усі умови твердження 1 виконуються і має місце консистентність оцінки. \square

Як приклад розглянемо випадок, коли функція $g(x, \gamma)$ є логістичною функцією:

$$g(x, \gamma) = \frac{1}{1 + e^{-\langle x, \gamma \rangle}} \quad (3)$$

Теорема 2 Нехай виконуються умови 1), 2), 3) теореми 1, функція g має вигляд (3) і $\forall \gamma \in R^d$: $P(\langle X^{(k)}, \gamma \rangle = 0) < 1$.

Тоді $b_n^{(\hat{k})} \xrightarrow{P} b^{(k)}, n \rightarrow \infty$.

Доведення. Доведення спирається на використання теореми 1, тому перевіримо виконання умов 4), 5), 6). Умова 4) впливає і умови 3), обмеженості функції g та всіх її похідних.

Далі покажемо, що умова 5) теореми 1 виконується, тобто, що функції $g(x, \gamma), \nabla g(x, \gamma)$ – рівностепеневно неперервні по x . Доведемо, що градієнт та гессіан $g(x, \gamma)$ по γ будуть обмеженими. Позначимо

$$\begin{aligned} \nabla g(x, \gamma) &= (r(x, \gamma)_d)_{d=1}^D \text{ та} \\ H(g(x, \gamma)) &= (z(x, \gamma)_{(d,s)})_{d,s=1}^D \end{aligned}$$

Легко бачити, що $r(x, \gamma)$ та $z(x, \gamma)$ – обмежені:

$$\begin{aligned} |r(x, \gamma)_d| &= \\ &= |g(x, \gamma)(1 - g(x, \gamma))(-x_d)| \leq \\ &\leq |x_d|; d = 1, \dots, D; \\ |z(x, \gamma)_{(d,s)}| &= \\ &= |g(x, \gamma)(1 - g(x, \gamma))(1 - 2g(x, \gamma))(-x_d x_s)| \leq \\ &\leq |x_d x_s|; d, s = 1, \dots, D \end{aligned}$$

Ми показали, що градієнт та гесіан обмежені, і тому сімейства функцій $g(x, \gamma), \nabla g(x, \gamma)$ будуть рівностепенно неперервними.

Перевіримо умову 6). Покажемо, що з рівності $\gamma = b^{(k)}$ випливає:

$$E_s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma) = 0.$$

Дійсно,

$$\begin{aligned} E_s(X^{(k)}, Y^{(k)}, b^{(k)}) &= \\ &= E(Y^{(k)} - -g(X^{(k)}, b^{(k)}))\nabla g(X^{(k)}, b^{(k)}) \quad (4) \end{aligned}$$

За умови, що $Y^{(k)} = g(X^{(k)}, b^{(k)}) + \varepsilon^{(k)}$, (4) набуває наступного вигляду:

$$\begin{aligned} E_s(X^{(k)}, Y^{(k)}, b^{(k)}) &= \\ &= E(g(X^{(k)}, b^{(k)}) + \varepsilon^{(k)} - -g(X^{(k)}, b^{(k)}))\times \\ &\quad \times \nabla g(X^{(k)}, b^{(k)}) = \\ E\varepsilon^{(k)}\nabla g(X^{(k)}, b^{(k)}) &= E\varepsilon^{(k)}E\nabla g(X^{(k)}, b^{(k)}) = 0, \end{aligned}$$

оскільки $X^{(k)}$ та $\varepsilon^{(k)}$ незалежні та $E(\varepsilon^{(k)}) = 0$.

Для доведення еквівалентності з умови 6) покажемо що з рівності $E_s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma) = 0$ матимемо рівність $\gamma = b^{(k)}$. Доведемо це методом від супротивного. Припустимо, що $E_s(X^{(k)}, Y^{(k)}, \gamma) = 0$, але $\gamma \neq b^{(k)}$.

Оскільки $g(X^{(k)}, \gamma)$ – монотонно зростаюча функція по $\langle X^{(k)}, \gamma \rangle$, а $\nabla g(X^{(k)}, \gamma) > 0$, то вираз

$$\begin{aligned} \langle (g(X^{(k)}, b^{(k)}) - g(X^{(k)}, \gamma)) \times \\ \times \nabla g(X^{(k)}, \gamma) X^{(k)}, b^{(k)} - \gamma \rangle \geq 0, \end{aligned}$$

а отже і його математичне сподівання невід'ємне. Далі покажемо, що воно не може бути нулем за наших припущень. Дійсно, математичне сподівання виразу (5) буде нулем при виконанні умови

$$\begin{aligned} (g(X^{(k)}, b^{(k)}) - g(X^{(k)}, \gamma)) \times \\ \times \nabla g(X^{(k)}, \gamma) \langle X^{(k)}, b^{(k)} - \gamma \rangle \equiv 0 \end{aligned}$$

майже напевно.

Оскільки градієнт $\nabla g(X^{(k)}, \gamma)$ обмежений і строго додатний та $(g(X^{(k)}, b^{(k)}) - g(X^{(k)}, \gamma))$ не дорівнює нулю через монотонність g по $\langle X^{(k)}, b \rangle$, тоді $\langle X^{(k)}, b^{(k)} - \gamma \rangle = 0$ майже напевно. Нагадаємо, що згідно з умовою теореми $P(\langle X^{(k)}, b \rangle = 0) < 1, \forall b \in \mathbb{R}^d$. Тому початкове припущення хибне і $\gamma = b^{(k)}$.

Умови 4), 5), 6) теореми 1 перевірені та має місце консистентність оцінки для моделі логістичної регресії. □

4 Результати моделювання

Нами була проведена серія експериментів для перевірки збіжності наведених вище оцінок. Суміш складалася із $M = 2$ компонентів. Розподіли регресорів та похибок для компонента $k \in \{1, 2\}$ мали вигляд: $X^{(k)} \sim N(m_k, \sigma_k^2)$, $\varepsilon^{(k)} \sim N(0, \sigma_{\varepsilon, k}^2)$. Функція $g(x, \gamma)$ у моделюванні має вигляд логістичної функції:

$$g(x, b) = \frac{1}{1 + e^{-b_0 - b_1 x}}$$

Відповідно, параметри розподілів та параметри логістичної регресії кожного компонента наведені у таблиці 1:

	КОМПОНЕНТ	
	1	2
m_k	0.0	1.0
ε_k^2	2.0	2.0
$\sigma_{\varepsilon, k}^2$	0.05	0.05
$b_0^{(k)}$	0.5	0.5
$b_1^{(k)}$	2	-1/3

Таблиця 1.

Ймовірності $p_{j, m}$ були згенеровані наступною стохастичною процедурою

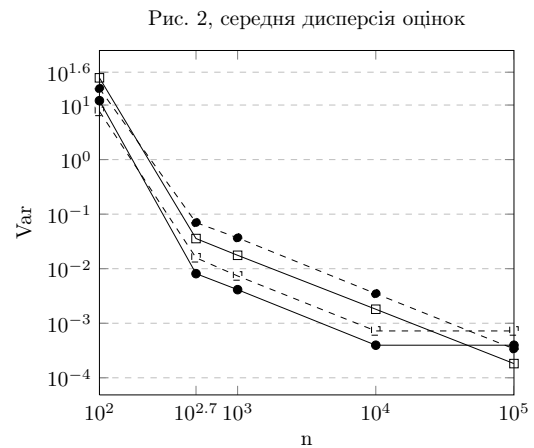
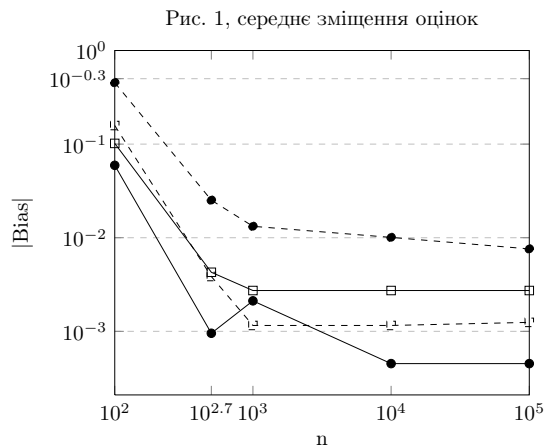
$$p_{j, m} = \frac{u_{j, m}}{\sum_{k=1}^M u_{j, k}},$$

де $u_{j, m}$ – незалежні псевдовипадкові числа, розподілені рівномірно на $[0, 1]$.

Для різних розмірів вибірки n експеримент був повторений $H = 1000$ разів. За отриманими

вибірками з оцінок ми порахували зміщення та дисперсію. Результати наведені на рисунках 1 та 2. Чорним пунктиром та суцільною чорною лінією позначені графіки для першого та дру-

гого компонента відповідно. Крапками позначили величину характеристик параметрів $b_1^{(k)}$, квадратами – значення параметру $b_0^{(k)}$.



Список використаних джерел

1. D. M. Titterington, A. F. Smith, U. E. Makov, Analysis of Finite Mixture Distributions / D. M. Titterington, A. F. Smith, U. E. Makov // Wiley, New York (1985)
2. McLachlan, G.J., Peel, D. Finite mixture models / McLachlan, G.J., Peel, D. // Wiley-Interscience (2000)
3. Shao, Jun, Mathematical Statistics / Shao, Jun // Springer, 2007.
4. Liubashenko D., Maiboroda R. Linear regression by observations from mixture with varying concentrations / Liubashenko D., Maiboroda R // Modern Stochastics: Theory and Applications, 2 ,No 4, 343 – 353, (2015)
5. Maiboroda, R., Statistical analysis of mixtures / Maiboroda, R // Kyiv University Publishers, Kyiv (in Ukrainian) (2003)
6. Maiboroda, R., Sugakova, O., Statistics of mixtures with varying concentrations with application to DNA microarray data analysis / Maiboroda, R., Sugakova, O. // Journal of nonparametric statistics. 24 , No 1 201–205 (2012)

References

1. TITTERINGTON, D. M., SMITH, A. F., MAKOV, U. E. (1985) Analysis of Finite Mixture Distributions. Wiley, New York
2. MCLACHLAN, G.J., PEEL, D. (2000) Finite mixture models. Wiley-Interscience
3. SHAO, JUN (2007) Mathematical Statistics. Springer, 2007.
4. LIUBASHENKO, D., MAIBORODA, R. (2015) Linear regression by observations from mixture with varying concentrations. Modern Stochastics: Theory and Applications, 2 ,No 4, 343 – 353
5. MAIBORODA, R. (2003) Statistical analysis of mixtures. Kyiv University Publishers, Kyiv (in Ukrainian)
6. MAIBORODA, R., SUGAKOVA, O. (2012) Statistics of mixtures with varying concentrations with application to DNA microarray data analysis. Journal of nonparametric statistics. 24 , No 1 201–205 (2012)

Received: 24.05.2018

УДК 519.21

I.V. Rozora, *к.ф.-м.н., доц.*

Швидкість збіжності для оцінки імпульсної перехідної функції у просторі неперервних функцій

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64.
e-mail: irozora@bigmir.net

I.V. Rozora, *Ph.D., Associate Prof.*

Convergence rate for the estimation of impulse response function in the space of continuous functions

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska st.
e-mail: irozora@bigmir.net

В роботі досліджується фізично здійснима однорідна лінійна система з імпульсною перехідною функцією. В якості оцінки імпульсної функції розглядається сумісна корелограма між процесами на вході та виході системи. Знаходиться розподіл похибки оцінювання імпульсної функції в просторі неперервних функцій.

Ключові слова: імпульсна перехідна функція, лінійна однорідна система, гауссовий процес, сумісна корелограма.

The problem of estimation of a stochastic linear system has been a matter of active research for the last years. One of the simplest models considers a 'black box' with some input and a certain output. The input may be single or multiple and there is the same choice for the output. This generates a great amount of models that can be considered. The sphere of applications of these models is very extensive, ranging from signal processing and automatic control to econometrics (errors-in-variables models). In this paper a time-invariant continuous linear system is considered with a real-valued impulse response function. We assume that impulse function is square-integrable. Input signal is supposed to be Gaussian stationary stochastic process with known spectral density. A sample input-output cross-correlogram is taken as an estimator of the response function. An upper bound for the tail of the distribution of the supremum of the estimation error is found that gives a convergence rate of estimator to impulse response function.

Key Words: impulse response function, linear time-invariant system (LTI), Gaussian process, cross-correlogram.

Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Вступ

Задача оцінювання характеристик лінійних систем різної фізичної природи виникає у багатьох галузях, наприклад, у радіофізиці, сейсмології, метеорології, теорії сигналів та автоматичного контролю, теорії фільтрації, фінансовій математиці тощо. Останнім часом цей напрям досить активно розвивається.

Деякі методи оцінювання невідомих імпульсних перехідних функцій лінійних систем та вивчення властивостей відповідних оцінок розглядалися у роботах В.Булдігіна та його учнів. У класі лінійних систем важливий підклас складають неперервні однорідні системи. В якості оцінок беруться сумісні періодограми або сумісні корелограми між процесами на вході та виході системи.

Для корелограмної дискретної за ча-

сом оцінки у роботах В.Булдігіна, В.Зайця, В.Курочки та Ф.Уцета [2], [4] вивчалися умови асимптотичної незміщеності та консистентності у середньому квадратичному, а також умови асимптотичної нормальності як у сенсі збіжності скінченновимірних розподілів, так у сенсі збіжності відповідних розподілів у просторі неперервних функцій.

В працях В.Булдігіна та І.Блажівської [1] встановлюється асимптотична незміщеність та консистентність у середньому квадратичному корелограмної інтегральної оцінки; з менш обмежувальними умовами, ніж в статтях В.Булдігіна і Фу Лі, вивчалися питання асимптотичної нормальності оцінки та похибки оцінювання у просторі неперервних функцій.

Потрібно зауважити, що у вищезгаданих роботах вивчаються асимптотичні властивості

оцінок перехідної імпульсної функції і не приділяється увага знаходженню точних оцінок розподілів для супремуму похибки оцінювання. Вперше такі оцінки були знайдені в роботі Ю. Козаченка та І. Розори [7].

В даній роботі розглядається корелограма інтегральна оцінка імпульсної перехідної функції та знаходиться оцінка розподілу супремуму похибки оцінювання при інших умовах на імпульсну перехідну функцію ніж в статті [7].

2 Корелограми та їх властивості

Розглянемо фізично здійсниму однорідну систему з імпульсною перехідною функцією $H(\tau)$, $\tau \in \mathbf{R}$. Це означає, що дійснозначна функція $H(\tau) = 0$ при $\tau < 0$, а реакція системи на допустимий вхідний сигнал $X(t)$, $t \in \mathbf{R}$, має вигляд

$$Y(t) = \int_0^{\infty} H(\tau)X(t - \tau)d\tau. \quad (1)$$

При вивченні таких систем виникає задача оцінювання функції H за спостереженнями за реакцією системи на вхідний сигнал. У даній статті розглядається корелограмний метод оцінювання імпульсної перехідної функції H за умови $H \in L_2(\mathbf{R})$.

Розглянемо дійснозначний стаціонарний центрований гауссівський випадковий процес $X = (X(t), t \in \mathbf{R})$, що збуджує систему (1). Нехай $f = (f(\lambda), \lambda \in \mathbf{R})$ — спектральна щільність процесу X . Припускаємо, що дана функція неперервна і задовольняє умовам

$$\sup_{\lambda \in \mathbf{R}} |f(\lambda)| < \infty; \\ K_X \in L_1(\mathbf{R}),$$

де $K_X(t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda t} f(\lambda)d\lambda$, $t \in \mathbf{R}$, — кореляційна функція випадкового процесу X .

Оцінку для H в точці τ , $\tau > 0$, визначимо у вигляді сумісної емпіричної корелограми між вхідним та вихідним процесами (див., наприклад, [1])

$$\hat{H}_T(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T Y(t + \tau)X(t)dt, \quad \tau > 0, \quad (2)$$

де T — довжина інтервалу усереднення, при цьому підході до оцінювання H припускається

також, що $X(t) = X_{\Delta}(t)$, тобто на вхід системи подається сім'я процесів, залежних від параметра $\Delta > 0$ та із певним виглядом спектральної щільності. В подальшому параметр Δ будемо опукати.

Припустимо, що $H \in L_2(\mathbf{R})$.

Через

$$H^*(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\lambda t} H(t)dt, \quad \lambda \in \mathbf{R},$$

позначимо перетворення Фур'є-Планшереля функції H .

Зауваження 1. Інтеграли в (1) та (2) розглядаються як середньоквадратичні інтеграли Рімана.

Інтеграл в (1) існує тоді і тільки тоді, коли існує інтеграл Рімана (див. [5], ст. 278)

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} H(\tau)K_X(s - \tau)H(s)dsd\tau. \quad (3)$$

Якщо в даному інтегралі використати зображення кореляційної функції через спектральну щільність та перетворення Фур'є-Планшереля для функції $H(\tau)$, отримаємо

$$\int_0^{\infty} \int_0^{\infty} H(\tau)K(s - \tau)H(s)dsd\tau = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} H^*(-\lambda) \cdot H^*(\lambda)f(\lambda)d\lambda.$$

Оскільки $\sup_{\lambda \in \mathbf{R}} |f(\lambda)| < \infty$ і $H \in L_2(\mathbf{R})$, то інтеграл (3) існує, а отже, і існує інтеграл в (1).

Будемо вважати, що інтеграл (3) існує також як інтеграл Лебега.

Легко підрахувати, що математичне сподівання $\hat{H}_T(\tau)$ дорівнює

$$E\hat{H}_T(\tau) = \int_0^{\infty} H(s)K_X(\tau - s)ds. \quad (4)$$

Отже, з (4) маємо, що в загальному випадку

$$E\hat{H}_T(\tau) \neq H(\tau), \quad \tau \in \mathbf{R}.$$

Це означає, що оцінка $\hat{H}_T(\tau)$ є зміщеною.

В роботах [1] та [3] розглядаються послідовності коваріаційних функцій, які залежать від параметру Δ , і знаходяться умови, коли оцінка $\hat{H}_{T,\Delta}(\tau)$ є асимптотично незміщеною для $H(\tau)$ при $\Delta \rightarrow \infty$. Також в [3] показано, що за певних умов $\hat{H}_{T,\Delta}(\tau) \rightarrow H(\tau)$ з ймовірністю 1 при $\Delta \rightarrow \infty$ і $T \rightarrow \infty$.

Зауваження 2. З роботи [1] випливає, що всі потрібні умови для асимптотичної незміщеності та для збіжності з ймовірністю 1 виконуються для послідовності таких спектральних щільностей

$$f_{\Delta}(\lambda) = \frac{c}{2\pi} \exp\left\{-\frac{\lambda^2}{\Delta}\right\}, \quad \lambda \in \mathbf{R}, \Delta > 0. \quad (5)$$

Нехай

$$\hat{Z}_T(\tau) = \hat{H}_T(\tau) - E\hat{H}_T(\tau).$$

В [1] показано, що кореляційна функція $\hat{Z}_T(\tau)$ має вигляд

$$\begin{aligned} E\hat{Z}_T(\tau_1)\hat{Z}_T(\tau_2) = & \\ = \frac{2\pi}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} & \left(e^{i(\tau_1-\tau_2)\lambda_2} |H^*(\lambda_2)|^2 + \right. \\ + e^{i(\tau_1\lambda_1+\tau_2\lambda_2)} & H^*(\lambda_1)H^*(\lambda_2) \Big) \times \\ \times \Phi_T(\lambda_2 - \lambda_1) & f(\lambda_1)f(\lambda_2)d\lambda_1d\lambda_2, \end{aligned} \quad (6)$$

де $\Phi_T(\lambda)$ — ядро Фейєра

$$\Phi_T(\lambda) = \frac{1}{2\pi T} \left(\frac{\sin(T\lambda/2)}{\lambda/2} \right).$$

Нехай S — параметрична множина. Функція $\rho(t, s)$ називається псевдометрикою на S , якщо вона задовольняє всі аксіоми метрики, окрім того, що множина $\{(t, s) \in S \times S : \rho(t, s) = 0\}$ може бути більшою ніж діагональ $\{(t, s) \in S \times S : t = s\}$.

Розглянемо функцію (див. [3])

$$g_H(\tau) = \left[\int_{-\infty}^{\infty} |H^*(\lambda)|^2 \sin^2 \frac{\lambda\tau}{2} d\lambda \right]^{1/2}, \quad \tau > 0. \quad (7)$$

Оскільки $H \in L_2(\mathbf{R})$, то функція (7) коректно визначена та породжує псевдометрику

$$\sqrt{\sigma}(\tau_1, \tau_2) = \sqrt{g_H(|\tau_1 - \tau_2|)}, \quad \tau_1, \tau_2 \in \mathbf{R}.$$

Доведення того, $\sqrt{\sigma}(\tau_1, \tau_2)$ є псевдометрикою можна подивитись у [3].

В роботі Козачено Ю, Розора І. доведено такий результат:

Теорема 2.1. [7] Припустимо, що $H \in L_2(\mathbf{R})$ і $\sup_{\lambda \in \mathbf{R}} |f(\lambda)| < \infty$, де $f(t)$ — спектральна щільність процесу $X(t)$, та наступний інтеграл є збіжним

$$\int_{-\infty}^{\infty} |H^*(\lambda)|^2 \ln^{2\alpha} \left(\frac{\lambda}{2} + e^\alpha \right) d\lambda < \infty, \quad \alpha > 0.$$

Тоді

$$\begin{aligned} & \left(E|\hat{Z}_T(\tau_1) - \hat{Z}_T(\tau_2)|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq K_{\ln} \cdot \ln^{-\frac{\alpha}{2}} \left(\frac{1}{|\tau_1 - \tau_2|} + e^\alpha \right), \quad \tau_1, \tau_2 \in \mathbf{R}, \alpha > 0, \end{aligned} \quad (8)$$

де K_{\ln} має вигляд

$$\begin{aligned} K_{\ln} = K_{\ln}(T) = \frac{4\sqrt{\pi}}{\sqrt{T}} \cdot \sup_{t \in \mathbf{R}} |f(t)| \cdot \|H^*\|_{\frac{1}{2}} \cdot \\ \cdot \left(\int_{-\infty}^{\infty} |H^*(\lambda)|^2 \ln^{2\alpha} \left(\frac{\lambda}{2} + e^\alpha \right) d\lambda \right)^{1/4}. \end{aligned} \quad (9)$$

3 Квадратично-Гауссові випадкові процеси

В даному розділі розглядаються означення та деякі властивості квадратично-гауссових випадкових величин і процесів.

Нехай (Ω, F, P) — ймовірнісний простір та (T, ρ) — компактний метричний простір з метрикою ρ .

Наведемо означення із книги [6].

Означення 3.1. [6] Нехай $\Xi = \{\xi_t, t \in T\}$ — сім'я сумісно гауссівських випадкових величин, $E\xi_t = 0$ (наприклад, $\xi_t, t \in T$, є гауссівським випадковим процесом).

Простір $SG_{\Xi}(\Omega)$ називається простором квадратично-гауссових випадкових величин, якщо кожен елемент $\eta \in SG_{\Xi}(\Omega)$ можна представити у вигляді

$$\eta = \bar{\xi}^T A \bar{\xi} - E\bar{\xi}^T A \bar{\xi}, \quad (10)$$

де $\bar{\xi}^T = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$, $\xi_k \in \Xi$, $k = 1, \dots, n$, A — дійснозначна матриця,

або $\eta \in SG_{\Xi}(\Omega)$ представляється як середньоквадратична границя послідовності випадкових величин з (10)

$$\eta = l.i.m. n \rightarrow \infty (\bar{\xi}_n^T A \bar{\xi}_n - E\bar{\xi}_n^T A \bar{\xi}_n).$$

Означення 3.2. [6] Випадковий процес $\xi(t) = \{\xi(t), t \in \mathbf{T}\}$ називається квадратично-гауссовим, якщо для кожного $t \in \mathbf{T}$ випадкова величина $\xi(t)$ належить простору $SG_{\Xi}(\Omega)$.

Відомо також, що

- $SG_{\Xi}(\Omega)$ є банаховим простором з нормою $\|\zeta\| = \sqrt{E\zeta^2}$;
- $SG_{\Xi}(\Omega)$ є підпростором простору Орліча, що породжується функцією

$$U(x) = \exp|x| - 1;$$

- норма $\|\zeta\|_{L_U(\Omega)}$ на $SG_{\Xi}(\Omega)$ еквівалентна нормі $\sqrt{E\zeta^2}$.

Приклад 1. Розглянемо сім'ю гауссівських центрованих випадкових процесів

$\xi_1(t), \xi_2(t), \dots, \xi_n(t), t \in \mathbf{T}$. Нехай матриця $A(t)$ є симетричною. Тоді

$$X(t) = \bar{\xi}^T(t)A(t)\bar{\xi}(t) - E\bar{\xi}^T(t)A(t)\bar{\xi}(t),$$

де $\bar{\xi}^T(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \dots, \xi_n(t))$, є квадратично-гауссовим випадковим процесом.

Загальні властивості квадратично-гауссових випадкових процесів можна знайти в роботах [6], [8].

Через $N(u)$ позначимо мінімальну кількість замкнених куль радіуса u , що покривають множину \mathbf{T} з метрикою ρ .

Нехай $\xi(t) = \{\xi(t), t \in \mathbf{T}\}$ — квадратично-гауссовий випадковий процес. Припустимо, що існує функція $\sigma(h), h > 0$, яка є монотонно зростаючою, неперервною і $\sigma(h) \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$, а також

$$\sup_{\rho(t,s) \leq h} (\mathbf{Var}(\xi(t) - \xi(s)))^{\frac{1}{2}} \leq \sigma(h).$$

Визначимо деякі сталі:

$$\varepsilon_0 = \inf_{t \in \mathbf{T}} \sup_{s \in \mathbf{T}} \rho(t, s), \quad t_0 = \sigma(\varepsilon_0),$$

$$\gamma_0 = \sup_{t \in \mathbf{T}} (\mathbf{Var} \xi(t))^{1/2},$$

Позначимо $C = \max\{t_0, \gamma_0\}$.

Теорема 3.1. [6] Нехай $\xi(t) = \{\xi(t), t \in \mathbf{T}\}$ — сепарабельний квадратично-гауссовий випадковий процес, зростаюча функція $r(u) \geq 0, u \geq 1$,

є такою, що $r(u) \rightarrow \infty$ при $u \rightarrow \infty$ і функція $r(\exp\{t\})$ є опуклою. Нехай

$$\int_0^{t_0} r(N(\sigma^{(-1)}(u)))du < \infty.$$

Тоді для всіх $x > 0$

$$\begin{aligned} & \mathbf{P} \left\{ \sup_{t \in \mathbf{T}} |\xi(t)| > x \right\} \leq \\ & \leq 2 \inf_{0 < p < 1} \left\{ r^{(-1)} \left(\frac{1}{t_0 p} \int_0^{t_0 p} r(N(\sigma^{(-1)}(\nu))) d\nu \right) \right. \\ & \left. \times \left(1 + \frac{\sqrt{2}x(1-p)}{C} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{x(1-p)}{\sqrt{2}\gamma_0} \right\} \right\}. \end{aligned}$$

4 Про швидкість збіжності корелограм в просторі неперервних функцій

Даний розділ присвячений знаходженню швидкості збіжності корелограмних інтегральних оцінок невідомих імпульсних перехідних функцій лінійних систем в просторі неперервних функцій. А саме, знаходиться оцінка розподілу супремуму похибки оцінювання на відрізок $[0, A]$.

Припустимо, що $X = (X(t), t \in \mathbb{R})$ вимірний дійснозначний стаціонарний центрований гауссівський процес, що збудує систему (1).

Розглянемо корелограму

$$\hat{H}_T(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T Y(t+\tau)X(t)dt, \quad \tau > 0,$$

що є оцінкою імпульсної перехідної функції H . Випадковий процес $Y(t)$ визначається в (1).

Доведемо допоміжну лему.

Лема 1. Випадковий процес $\hat{Z}_T(\tau) = \hat{H}_T(\tau) - E\hat{H}_T(\tau), \tau > 0$, є квадратично-гауссовим.

Доведення. Процес $\hat{Z}_T(\tau), \tau > 0$, можна подати у вигляді

$$\hat{Z}_T(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T (Y(t+\tau)X(t) - EY(t+\tau)X(t))dt. \quad (11)$$

Оскільки кожна інтегральна сума (11)

$$\sum_k (Y(t_k + \tau)X(t_k) - EY(t_k + \tau)X(t_k)) \Delta t_k$$

належить простору $SG_{\Xi}(\Omega)$, а сам процес $\hat{Z}_T(\tau)$ є середньо-квадратичною границею цих сум, то $\hat{Z}_T(\tau)$ є квадратично-гауссовим процесом. Отже, лема повністю доведена. \square

Розглянемо точність оцінювання як різницю оцінки $\hat{H}_T(\tau)$ та імпульсної перехідної функції $H(\tau)$

$$\hat{H}_T(\tau) - H(\tau), \quad \tau > 0.$$

Оцінимо супремум похибки оцінювання на відрізьку $[0, A]$, де A —деяке фіксоване додатне число.

$$P\left\{ \sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{H}_T(\tau) - H(\tau)| \geq \varepsilon \right\}, \quad \varepsilon > 0.$$

Позначимо

$$h(\tau) = E\hat{H}_T(\tau) - H(\tau), \quad \tau \in [0, A].$$

Припустимо, що функція $h(\tau)$ є обмеженою на відрізьку $[0, A]$.

Зауваження 3. Дана умова виконується, коли, наприклад, функції $E\hat{H}_T(\tau)$ і $H(\tau)$ є неперервними на $[0, A]$.

Позначимо

$$h_- = \min_{\tau \in [0, A]} h(\tau), \quad h_+ = \max_{\tau \in [0, A]} h(\tau),$$

$$h^* = \max_{\tau \in [0, A]} |h(\tau)| = \max\{h_+, -h_-\}.$$

Із співвідношення (6) випливає, що

$$\gamma_0 = \gamma_0(T) = \sup_{\tau \in [0, A]} (\mathbf{Var} \hat{Z}_T(\tau))^{1/2} =$$

$$= \sup_{\tau \in [0, A]} \left(\frac{2\pi}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (|H^*(\lambda_2)|^2 + e^{i\tau(\lambda_1 + \lambda_2)} H^*(\lambda_1) H^*(\lambda_2)) \times \right. \\ \left. \times \Phi_T(\lambda_2 - \lambda_1) f(\lambda_1) f(\lambda_2) d\lambda_1 d\lambda_2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Позначимо

$$C = C(T) = \max\left\{ \gamma_0, K_{\ln} \ln^{-\frac{\alpha}{2}} \left(\frac{2}{A} + e^\alpha \right) \right\},$$

де значення K_{\ln} з (9).

Теорема 4.1. Нехай $X = (X(t), t \in \mathbb{R})$ — сепарабельний дійснозначний стаціонарний гауссівський процес, що збурює систему (1). Припустимо, що перехідна функція $H \in L_2(\mathbf{R})$ і для деякого $\alpha \in (0, 1]$ виконується умова

$$\int_{-\infty}^{\infty} |H^*(\lambda)|^2 \ln^{2\alpha} \left(\frac{\lambda}{2} + e^\alpha \right) d\lambda < \infty, \quad \alpha > 2.$$

Для спектральної щільності $f(t)$ випадкового процесу $X(t)$ виконується умова $\sup_{\lambda \in \mathbf{R}} |f(\lambda)| < \infty$. Тоді для

$$\varepsilon > h^*,$$

має місце нерівність

$$P \left\{ \sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{H}_T(\tau) - H(\tau)| > \varepsilon \right\} \leq \\ \leq 2Ae^{\frac{\alpha}{\alpha-2}} \inf_{p \in (0, 1)} \left\{ \left(\frac{A}{2} + e^\alpha \right)^{\frac{1}{p^{2/\alpha}}} \times \left(1 + \frac{\sqrt{2}(\varepsilon - h^*)(1-p)}{C} \right)^{\frac{1}{2}} \times \exp \left\{ -\frac{(\varepsilon - h^*)(1-p)}{\sqrt{2}\gamma_0} \right\} \right\}. \quad (12)$$

Доведення. Різницю $\hat{H}_T(\tau) - H(\tau)$ можна подати в такому вигляді

$$\hat{H}_T(\tau) - H(\tau) = \hat{H}_T(\tau) - E\hat{H}_T(\tau) + h(\tau) = \\ = \hat{Z}_T(\tau) + h(\tau).$$

Тоді

$$\hat{H}_T(\tau) - H(\tau) \geq \varepsilon \Leftrightarrow \hat{Z}_T(\tau) \geq \varepsilon - h(\tau),$$

$$\hat{H}_T(\tau) - H(\tau) \leq -\varepsilon \Leftrightarrow \hat{Z}_T(\tau) \leq -\varepsilon - h(\tau).$$

Отже, для $\varepsilon > h^*$ отримаємо

$$\{|\hat{H}_T(\tau) - H(\tau)| \geq \varepsilon\} \subset \\ \subset \{|\hat{Z}_T(\tau)| \geq \min\{\varepsilon - h_+, \varepsilon + h_-\}\}$$

та

$$P\left\{ \sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{H}_T(\tau) - H(\tau)| \geq \varepsilon \right\} \leq$$

$$\leq P\left\{ \sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{Z}_T(\tau)| \geq \min\{\varepsilon - h_+, \varepsilon + h_-\} \right\}. \quad (13)$$

Очевидно, що $\min\{\varepsilon - h_+, \varepsilon + h_-\} = \varepsilon - h^*$

Для зручності позначимо

$$x = \varepsilon - h^*.$$

Оскільки з леми 1 випливає, що $\hat{Z}_T(\tau)$ є квадратично-гауссовим процесом, тоді для нього можна використати твердження теореми 3.1. З (8) випливає, що у якості функції $\sigma(h)$ можна розглянути $\sigma(h) = K_{\ln} \cdot \frac{1}{\ln^{\alpha/2}(\frac{1}{h} + e^\alpha)}$, де K_{\ln} з (9).

З означення функції $\sigma(u)$ випливає, що

$$\sigma^{(-1)}(u) = \left(\exp\{(K_{\ln}/u)^{2/\alpha}\} - e^\alpha \right)^{-1},$$

$$0 < u < \frac{K_{\ln}}{\alpha^{2/\alpha}},$$

тоді

$$N(\sigma^{(-1)}(u)) \leq \left(\frac{A}{2\sigma^{(-1)}(u)} + 1 \right) =$$

$$= \left(\frac{A}{2} (\exp\{(K_{\ln}/u)^{2/\alpha}\} - e^\alpha) + 1 \right).$$

Зауважимо, що

$$\frac{K_{\ln}}{\alpha^{2/\alpha}} > t_0 p,$$

так як $p \in (0, 1)$ і $\frac{(\ln(e^\alpha + \frac{2}{A}))^{\alpha/2}}{\alpha^{2/\alpha}} \geq 1$ при $\alpha > 0$ та в нашому випадку

$$t_0 = \sigma\left(\frac{A}{2}\right) = \frac{K_{\ln}}{\ln^{\alpha/2}\left(\frac{2}{A} + e^\alpha\right)}. \quad (14)$$

Оскільки для $u \in (0, t_0 p)$ має місце співвідношення

$$1 - \frac{A}{2} e^\alpha \leq \frac{A}{2} \exp\left\{\left(\frac{K_{\ln}}{u}\right)^{2/\alpha}\right\},$$

то

$$N(\sigma^{(-1)}(u)) \leq A \exp\{(K_{\ln}/u)^{2/\alpha}\}.$$

Розглянемо тепер функцію

$$r(u) = (\ln u)^\beta, \quad \beta \in [1, \frac{\alpha}{2}), \quad u \geq 1.$$

Легко перевірити, що вона задовольняє умовам теореми 3.1. А тому для $u \in (0, t_0 p)$ виконується наступне твердження

$$r(N(\sigma^{(-1)}(u))) \leq r\left(A \cdot \exp\{(K_{\ln}/u)^{2/\alpha}\}\right) \leq$$

$$\leq \left(\ln A + (K_{\ln}/u)^{2/\alpha}\right)^\beta$$

$$\leq \left(\frac{K_{\ln}}{u}\right)^{2\beta/\alpha} \left(\ln A \left(\frac{t_0 p}{K_{\ln}}\right)^{2/\alpha} + 1\right)^\beta. \quad (15)$$

Оскільки обернена функція до $r(u)$ дорівнює

$$r^{(-1)}(u) = \exp\{x^{1/\beta}\}, \quad \beta \in [1, \frac{\alpha}{2}),$$

то, використовуючи оцінку (15) та значення t_0 з (14), маємо

$$r^{(-1)}\left(\frac{1}{t_0 p} \int_0^{t_0 p} r\left(N\left(\sigma^{(-1)}(\nu)\right)\right) d\nu\right) =$$

$$= \exp\left\{\left(\frac{1}{t_0 p} \int_0^{t_0 p} r\left(N\left(\sigma^{(-1)}(\nu)\right)\right) d\nu\right)^{1/\beta}\right\} \leq$$

$$\leq \exp\left\{\left(\frac{1}{t_0 p} \int_0^{t_0 p} \left(\frac{K_{\ln}}{u}\right)^{\frac{2\beta}{\alpha}} \left(\ln A \left(\frac{t_0 p}{K_{\ln}}\right)^{\frac{2}{\alpha}} + 1\right)^\beta d\nu\right)^{\frac{1}{\beta}}\right\} =$$

$$= \exp\left\{\left(\ln A \left(\frac{t_0 p}{K_{\ln}}\right)^{\frac{2}{\alpha}} + 1\right) \left(\frac{\alpha}{\alpha - 2\beta} \left(\frac{K_{\ln}}{t_0 p}\right)^{\frac{2\beta}{\alpha}}\right)^{\frac{1}{\beta}}\right\} =$$

$$= \exp\left\{\left(\frac{\alpha}{\alpha - 2\beta}\right)^{\frac{1}{\beta}} \left(\ln A + \left(\frac{K_{\ln}}{t_0 p}\right)^{\frac{2}{\alpha}}\right)\right\} =$$

$$= A \left(\frac{A}{2} + e^\alpha\right)^{\frac{1}{p^{2/\alpha}}} \exp\left\{\left(\frac{\alpha}{\alpha - 2\beta}\right)^{\frac{1}{\beta}}\right\}. \quad (16)$$

Якщо підставити оцінку (16) в невірність з теореми 3.1, то отримаємо

$$P\left\{\sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{Z}_T(\tau)| \geq x\right\} \leq$$

$$\leq 2A \left(\frac{A}{2} + e^\alpha\right)^{\frac{1}{p^{2/\alpha}}} \exp\left\{\left(\frac{\alpha}{\alpha - 2\beta}\right)^{1/\beta}\right\}$$

$$\times \left(1 + \frac{\sqrt{2}x(1-p)}{C}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{x(1-p)}{\sqrt{2}\gamma_0}\right\}.$$

Ліва частина нерівності не залежить від β . Тому знайдемо мінімум правої частини за β .

Оскільки функція

$$g(\beta) = \exp\left\{\left(\frac{\alpha}{\alpha - 2\beta}\right)^{1/\beta}\right\}$$

зростає за β , $\beta \in [1, \alpha/2)$, тому його мінімум досягається в точці $\beta = 1$ і дорівнює

$$\min_{\beta \in [1, \alpha/2)} g(\beta) = g(1) = \exp\left\{\frac{\alpha}{\alpha - 2}\right\}.$$

Отже, отримаємо

$$P\left\{\sup_{\tau \in [0, A]} |\hat{Z}_T(\tau)| \geq x\right\} \leq$$

$$\leq 2A \exp \left\{ \frac{\alpha}{\alpha - 2} \right\} \left(\frac{A}{2} + e^\alpha \right)^{\frac{1}{p^{2/\alpha}}} \\ \times \left(1 + \frac{\sqrt{2}x(1-p)}{C} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{x(1-p)}{\sqrt{2}\gamma_0} \right\}.$$

Якщо врахувати, що $x = \varepsilon - h^*$, то з останньої нерівності отримуємо твердження теореми. \square

Список використаних джерел

1. Булдігін В.В. Асимптотичні властивості корелограмних оцінок імпульсних перехідних функцій лінійних систем / В.В. Булдігін, І.П. Блажієвська // Наукові вісті НТУУ "КПІ".– 2010.– № 4.– С. 16–27.
2. Buldygin V.V. On cross-coorrelogram estimators of the response function in continuous linear systems from discrete observations / V.V.Buldygin, V.G. Kurotschka // Random Oper. and Stoch. Equ.–1999.– №7(1).–Р. 71–90.
3. Buldygin V. On asymptotic normality of an estimation of unit impulse responses of linear system I, II / V. Buldygin, Fu Li // Theor. Probability and Math. Statist.–1997.– № 54, № 55.– Р. 3–17, Р.30–37.
4. Buldygin V. Asymptotic normality of cross-coorrelogram estimators of the response function/ V. Buldygin, F. Utzet, V. Zaiats // Statistical Infernce for Stochastic Processes. – 2004.–№7.–Р.1–34.
5. Гихман И.И. Введение в теорию случайных процессов / И.И. Гихман, А.В. Скороход.– Москва, Наука.– 1977.
6. Козаченко Ю. Моделивання випадкових процесів та полів/ Ю.Козаченко, А.Пашко, І.Розора.– Київ, Задруга.– 2007.
7. Козаченко Ю. Про корелограмні оцінки імпульсних перехідних функцій / Ю.Козаченко, І.Розора // Теор. ймовір. та матем. статист.– 2015.– № 93.–С. 75–86.
8. Kozachenko Yu. Square-Gaussian random processes and estimators of covariance functions / Yu. Kozachenko, O. Stus O. // Math. Communications.–1998.– 3, №1.– Р.83–94.

5 Висновки

В роботі розглядалась корелограмна інтегральна оцінка імпульсної перехідної функції лінійної однорідної системи. Знайдено оцінку швидкості збіжності даної корелограми в просторі неперервних функцій. Тобто отримано оцінку розподілу супримуму похибки оцінювання.

References

1. BULDYGIN V., BLAZHIEVSKA I. (2010) Asymptotic properties of cross-correlogram estimators of impulse response functions in linear system *Research Bulletin of National Technical University of Ukraine "KPI*, 4, 16–27.
2. BULDYGIN V., KUROTSCHKA V. (1999) On cross-coorrelogram estimators of the response function in continuous linear systems from discrete observations *Random Oper. and Stoch. Equ.*, 7, №1, 71–90.
3. BULDYGIN V., FU LI (1997) On asymptotic normality of an estimation of unit impulse responses of linear system I, II *Theor. Probability and Math. Statist.*, 54, 55, 3–17, 30–37.
4. BULDYGIN V., UTZET F., ZAIATS V. (2004) Asymptotic normality of cross-coorrelogram estimators of the response function *Statistical Infernce for Stochastic Processes*, 7, 1–34.
5. GIKHMAN I, SKOROKHOD, A. (1996) *Introduction to the Theory of Random Processes*, Dover Publication, 544 p.
6. KOZACHENKO YU., PASHKO A., ROZORA I. (2007) *Simulation of Stochastic Processes and fields*, Zadruga, Kyi. (in Ukrainian)
7. KOZACHENKO YU., ROZORA I. (2015) On cross-correlogram estimators of impulse response functions *Theor. Probability and Math. Statist.*, 93, 75–86.
8. KOZACHENKO YU., STUS O. (1998) Square-Gaussian random processes and estimators of covariance functions, *Math. Communications*, 3, №1, 83–94.

Надійшла до редколегії: 20.02.2018

УДК 512.643.8

О.А. Тилищак, к. ф.-м. н., доцент

**Про незвідність мономіальних матриць
7-го порядку над локальними кільцями**

Ужгородський національний університет,
88000, м. Ужгород, пл. Народна, 3,
e-mail: alxtlk@gmail.com

O.A. Tylyshchak, Ph.D, Associate Professor

**On irreducibility of monomial
 7×7 -matrix over local ring**

Uzhhorod National University, 88000,
Uzhhorod, Narodna Square, 3,
e-mail: alxtlk@gmail.com

Розглядається квадратна мономіальна матриця, що відповідає циклічній підстановці довжини порядку матриці. Ненульові елементи непорожньої множини перших стовпчиків є одиниці а непорожньої множини решти — фіксований ненульовий твірний елемент радикалу Джексона комутативного локального кільця. Відомо, що така матриця порядку менше 7 незвідна тоді і тільки тоді, коли кількість одиниць взаємно проста з порядком матриці. Показано, що матриця 7-го порядку незвідна, якщо ступінь нільпотентності радикала вище 2.

Ключові слова: мономіальна матриця, незвідна матриця, матриця порядку 7, локальне кільце, кільце головних ідеалів, радикал Джекобсона.

We consider a monomial $n \times n$ -matrix, which corresponds to a cyclic permutation of the length n , over a commutative local principle ideals ring. Non-zero elements of a non-empty set of first columns of the matrix are identity element of the ring and non-zero elements of non-empty set of the rest columns are a fixed non-zero generator element of the Jacobson radical of the ring. It is known if number of identities or number of generator elements is exact 1 or if $n < 7$ and number of identities is relatively prime to n , then the matrix is irreducible. If the number of identities is not relatively prime to n , then the matrix is reducible. If the Jacobson radical of the ring is nilpotent of degree 2, then the 7×7 -matrix of considered form with 3 or 4 identities is reducible. It has been shown that the 7×7 -matrix is irreducible if the degree of nilpotency of the Jacobson radical of the ring is higher than 2. Some necessary conditions of reducibility of this square matrix of arbitrary size are also established.

Key Words: monomial matrix, irreducible matrix, 7×7 -matrix, local ring, principle ideal ring, Jacobson radical.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Бондаренко В.М.

1 Вступ

Задача про опис, з точністю до подібності, матриць над комутативним кільцем, що не є полем, містить в собі нерозв'язну задачу лінійної алгебри про пару матриць над полем вже для локальних кілець головних ідеалів. Для кілець з нільпотентним радикалом це вперше доведено в 1976 р. В.М. Бондаренком [1]. В таких випадках стає актуальною задача досліджень, з точністю до подібності, матриць спеціального вигляду і, зокрема, побудови серій незвідних чи нерозкладних матриць такого вигляду.

Далі через K будемо позначати комутативне локальне кільце, радикал Джекобсона якого $tK \neq 0$ ($t \in K$). Нехай k і n натуральні числа, $k < n$. Розглянемо мономіальну матрицю порядку n над кільцем K вигляду:

$$M(t, k, n) = \begin{pmatrix} \overbrace{0 \dots 0}^k & 0 & \dots & 0 & t \\ 1 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & t & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & t & 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

З результатів досліджень П. М. Гудивка та автора [2] випливає наступне твердження.

Теорема 1. Нехай K — комутативне локальне кільце, радикал Джекобсона якого $tK \neq 0$ ($t \in K$). Матриці $M(t, 1, n)$, $M(t, n - 1, n)$ порядку $n > 1$ незвідні над кільцем K .

Було показано [3], що для $(n, k) > 1$ матриця $M(t, k, n)$ звідна над кільцем K , а для $n < 7$, $(n, k) = 1$ матриця $M(t, k, n)$ незвідна. Якщо $t^2 = 0$ в [3, 4] показано, що матриці $M(t, 3, 7)$, $M(t, 4, 7)$ звідні. Якщо $t^2 \neq 0$ в роботі показано, що всі матриці $M(t, k, 7)$ незвідні.

2 Про звідність матриць $M(t, k, n)$

Через K^* будемо позначати мультиплікативну групу кільця K а $\overline{M} = |m_{ij} + tK|$ — матрицю над полем K/tK отриману з матриці $M = |m_{ij}|$ над кільцем K редукцією за модулем tK .

Теорема 2. *Нехай n і k натуральні числа, $k < n$, K — комутативне локальне кільце, радикал Джексона якого $tK \neq 0$ ($t \in K$). Якщо матриця $M(t, k, n)$ подібна (над K) до матриці $N = \begin{pmatrix} D & B \\ 0 & A \end{pmatrix}$, де D — квадратна матриця порядку m ($0 < m < n$), тоді D подібна (над K) до*

$$\begin{pmatrix} \overbrace{0 \dots 0}^{k'} & td_{1,k'+1} & \dots & td_{1m} \\ 1 & \dots & 0 & td_{2,k'+1} & \dots & td_{2m} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & td_{k'+1,k'+1} & \dots & td_{k'+1,m} \\ 0 & \dots & 0 & td_{k'+2,k'+1} & \dots & td_{k'+2,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & td_{n,k'+1} & \dots & td_{nm} \end{pmatrix} \quad (2)$$

для деякого k' ($0 < k' < k$).

Доведення. З подібності матриць $M(t, k, n)$ та N над K одержимо подібність над полем K/tK

$$\begin{pmatrix} J_{0,k+1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \overline{M(t, k, n)} \sim \begin{pmatrix} \overline{D} & \overline{B} \\ 0 & \overline{A} \end{pmatrix}, \quad (3)$$

де $J(\lambda, r)$ — Жорданова клітка порядку r з власним значенням λ над полем K/tK . Нехай φ — лінійний оператор скінченно вимірного лінійного простору L над полем K/tK з матрицею $\overline{M(t, k, n)}$ в деякому базисі $\{a_1, \dots, a_n\}$. Тоді $\text{Imm}\varphi$ має базис $\{a_2, \dots, a_{k+1}\}$, $\text{Ker}\varphi$ має базис $\{a_{k+1}, \dots, a_n\}$ і $\text{Ker}\varphi \cap \text{Imm}\varphi$ має базис $\{a_{k+1}\}$,

$$\text{Dim}(\text{Ker}\varphi \cap \text{Imm}\varphi) = 1. \quad (4)$$

З (3) випливає, що $\varphi \in$ лінійний оператор підпростору L' простору L над полем K/tK , що має матрицю \overline{D} в деякому базисі $\{a'_1, \dots, a'_{k'}$ підпростору L' . Очевидно, $\overline{M(t, k, n)}$, φ і \overline{D} нільпотентні. Тоді можна вважати, що \overline{D} блочно діагональна матриця з Жордановими клітками на головній діагоналі з всіма нульовими власними значеннями. Якщо \overline{D} має принаймні дві Жорданові клітки порядку більше 1, тоді

$$\overline{D} = \begin{pmatrix} J_{0,k'+1} & 0 & 0 \\ 0 & J_{0,k'+1} & 0 \\ 0 & 0 & * \end{pmatrix}$$

для деяких натуральних чисел k', k'' . Але $a'_{k'+1}, a'_{k'+k''+2} \in \text{Ker}\varphi \cap \text{Imm}\varphi$ і $\text{Dim}(\text{Ker}\varphi \cap \text{Imm}\varphi) \geq 2$, що суперечить (4).

З [4, лема 1, ст. 181] випливає, що \overline{D} ненульова матриця і \overline{D} має рівно одну Жорданову клітку порядку вище 1. Можна вважати, що $\overline{D} = \begin{pmatrix} J_{0,k'+1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ для деякого натурального k' . Очевидно, $k' = \text{rank}\overline{D} \leq \text{rank}\overline{M(t, k, n)} = k$. Якщо $k' = k$, тоді $\text{rank}\overline{D} = \text{rank}\overline{M(t, k, n)}$ і з (3) $\overline{A} = 0$. Що неможливо. Отже, $0 < k' < k$.

Нехай e_1, \dots, e_m — відповідні стовпчики одиничної матриці E_m . $e'_1 = e_1, e'_2 = De'_1, \dots, e'_{k'+1} = De'_{k'}$, $e'_{k'+2} = e_{k'+2}, \dots, e'_m = e_m$. Але $\overline{e'_2} = \overline{De_1} = \overline{e_2}, \dots, \overline{e'_{k'+1}} = \overline{De'_{k'}} = \overline{e_{k'+1}}$. Отже, $\overline{e'_1} = \overline{e_1}, \dots, \overline{e'_m} = \overline{e_m}$ і $\det(\overline{e'_1} \dots \overline{e'_m}) = \det(e_1 \dots e_m) = \det E_m = 1$. Оскільки кільце K локальне, то матриця $C = (e'_1 \dots e'_m)$ має оборотній детермінант і C оборотня над K .

Розглянемо $D' = C^{-1}DC = C^{-1}D \times (e'_1 \dots e'_m) = C^{-1}(De'_1 \dots De'_m) = C^{-1}(e'_2 \dots e'_{k'+1} De'_{k'+1} \dots De'_m) = (C^{-1}e'_2 \dots C^{-1}e'_{k'+1} C^{-1}De'_{k'+1} \dots C^{-1}De'_m) = (e_2 \dots e_{k'+1} C^{-1}De'_{k'+1} \dots C^{-1}De'_m)$. Очевидно, $\overline{C} = \overline{E_m}$ і $\overline{D'} = \overline{C^{-1}DC} = \overline{D} = (\overline{e_2} \dots \overline{e_{k'+1}} 0 \dots 0)$. Тоді D подібна до D' , що має форму (2). \square

Наслідок 1. *Нехай n і k натуральні числа, $k < n$, K — комутативне локальне кільце, радикал Джексона якого $tK \neq 0$ ($t \in K$). Якщо матриця $M(t, k, n)$ звідна над K , тоді $M(t, k, n)$ подібна (над K) до матриці $\begin{pmatrix} D & B \\ 0 & A \end{pmatrix}$, де D — квадратна матриця порядку m ($2 \leq m \leq \frac{n}{2}$).*

Доведення. Із звідності над K матриці $M(t, k, n)$ одержимо, що матриця $M(t, k, n)$ подібна (над K) до матриці $N = \begin{pmatrix} D & B \\ 0 & A \end{pmatrix}$, де D — квадратна матриця порядку m ($0 < m < n$). Очевидно, перестановкою рядків і тою ж перестановкою стовпчиків матриця $M(t, k, n)^T$ зводиться до $M(t, k, n)$. Тобто $M(t, k, n)^T$ подібна до $M(t, k, n)$. Але маємо також подібність

$$N^T = \begin{pmatrix} D^T & 0 \\ B^T & A^T \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} A^T & B^T \\ 0 & D^T \end{pmatrix}.$$

Тобто, можна вважати, що $m \leq n - m$, або $m \leq \frac{n}{2}$. За теоремою 2 для деякого натурального числа k' $k' + 1 \leq m$. Тоді $2 \leq m$. \square

3 Незвідність матриць $M(t, k, 7)$

Нехай далі K — комутативне локальне кільце, радикал Джекобсона якого tK ($t \in K$, $t^2 \neq 0$). Покажемо незвідність матриць $M(t, k, 7)$.

Лема 1. Матриця $M(t, k, 7)$ ($1 < k < 6$) не є подібна над K до матриці вигляду

$$N = \left(\begin{array}{cc|c} 0 & td_{12} & B \\ 1 & td_{22} & \\ \hline & 0 & A \end{array} \right).$$

Доведення. Якщо $d_{12} \in tK$, то $d_{12} = td'_{12}$ ($d'_{12} \in K$) і маємо подібність над K

$$\left(\begin{array}{cc} 0 & td_{12} \\ 1 & td_{22} \end{array} \right) \sim \left(\begin{array}{cc} td_{22} & t^2 d'_{12} + t^2 d_{22}^2 \\ 1 & 0 \end{array} \right).$$

Тоді над кільцем K/t^2K матриця $M(t, k, 7)$ подібна матриці з нульовим стовпчиком, який зміною порядку стовпчиків і відповідною зміною порядку рядків можна змістити на перше положення. Це суперечить теоремі 2.

Нехай тепер $d_{12} \in K^*$ і для деякої оборотної матриці $C = (c_{ij})$ порядку n над K

$$M(t, k, 7)C = CN. \quad (5)$$

Без втрати загальності, можна вважати, що $t^3 = 0$. Позначимо через $(5)_{[i,j]}$ скалярну рівність $(M(t, 2, 7)C)_{ij} = (CN)_{ij}$. Тоді

$$\begin{aligned} (5)_{[1,1]}: & \quad tc_{n1} = c_{12}, \\ (5)_{[2,1]}: & \quad c_{11} = c_{22}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (5)_{[k+1,1]}: & \quad c_{k1} = c_{k+1,2}, \\ (5)_{[k+2,1]}: & \quad tc_{k+1,1} = c_{k+2,2}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (5)_{[n,1]}: & \quad tc_{n-1,1} = c_{n2}. \end{aligned}$$

Таким чином $\overline{c_{12}} = \overline{c_{k+2,2}} = \dots = \overline{c_{n2}} = 0$.

$$\begin{aligned} (5)_{[1,2]}: & \quad tc_{n2} = tc_{11}d_{12} + tc_{12}d_{22}, \\ (5)_{[2,2]}: & \quad c_{12} = tc_{21}d_{12} + tc_{22}d_{22}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (5)_{[k+1,2]}: & \quad c_{k2} = tc_{k+1,1}d_{12} + tc_{k+1,2}d_{22}, \\ (5)_{[k+2,2]}: & \quad tc_{k+1,2} = tc_{k+2,1}d_{12} + tc_{k+2,2}d_{22}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (5)_{[n,2]}: & \quad tc_{n-1,2} = tc_{n1}d_{12} + tc_{n2}d_{22}. \end{aligned}$$

Отже, $\overline{c_{12}} = \dots = \overline{c_{k2}} = \overline{c_{k+2,2}} = \dots = \overline{c_{n2}} = 0$. В силу оборотності детермінанта матриці \overline{C} $c_{k+1,2} = c_{k1} \in K^*$.

Підставляючи $(5)_{[i,1]}$ в $(5)_{[i,2]}$ при $k = 2$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}, \\ tc_{21} = tc_{41}d_{12} + t^2c_{31}d_{22}, \\ t^2c_{31} = tc_{51}d_{12} + t^2c_{41}d_{22}, \\ t^2c_{41} = tc_{61}d_{12} + t^2c_{51}d_{22}, \\ t^2c_{51} = tc_{71}d_{12} + t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = tc_{11}d_{12} + t^2c_{71}d_{22}, \\ tc_{71} = tc_{21}d_{12} + tc_{11}d_{22}. \end{array} \right.$$

З 1-го рівняння $c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}$, з останнього рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} = c_{21}d_{12} + c_{11}d_{22} + t^2c'_{71}$ ($c'_{71} \in K$). Після підстановки отримаємо систему

$$\left\{ \begin{array}{l} tc_{21} = tc_{41}d_{12} + t^2c_{31}d_{22}, \\ t^2c_{31} = tc_{51}d_{12} + t^2c_{41}d_{22}, \\ t^2c_{41} = tc_{61}d_{12} + t^2c_{51}d_{22}, \\ t^2c_{51} = tc_{21}d_{12}^2 + t^2c_{61}d_{22} + t^2c_{31}d_{12}^2d_{22} + \\ \quad t^2c_{21}d_{12}d_{22}^2, \\ t^2c_{61} = t^2c_{31}d_{12}^2 + 2t^2c_{21}d_{12}d_{22}. \end{array} \right.$$

З 4-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо $c_{21}d_{12}^2 \in tK$, що неможливо, бо $c_{21}, d_{12} \in K^*$.

Підставляючи $(5)_{[i,1]}$ в $(5)_{[i,2]}$ при $k = 3$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}, \\ c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}, \\ tc_{31} = tc_{51}d_{12} + t^2c_{41}d_{22}, \\ t^2c_{41} = tc_{61}d_{12} + t^2c_{51}d_{22}, \\ t^2c_{51} = tc_{71}d_{12} + t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = tc_{11}d_{12} + t^2c_{71}d_{22}, \\ tc_{71} = tc_{21}d_{12} + tc_{11}d_{22}. \end{array} \right.$$

З 1-го та 2-го рівняння відповідно маємо: $c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}$, $c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}$, з останнього рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} = c_{21}d_{12} + c_{11}d_{22} + t^2c'_{71}$ ($c'_{71} \in K$) і з 3-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ і $d_{12} \in K^*$ $c_{61} = tc_{41}d_{12}^{-1} - tc_{51}d_{12}^{-1}d_{22} + t^2c'_{61}$ ($c'_{61} \in K$). Після підстановки одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = t^2c_{31}d_{12}^2, \\ tc_{31} = tc_{51}d_{12} + t^2c_{41}d_{22}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{41}d_{12}^3 + 2t^2c_{31}d_{12}^2d_{22}. \end{array} \right.$$

З 1-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ одержуємо $c_{31}d_{12}^2 \in tK$, що неможливо, бо $c_{31}, d_{12} \in K^*$.

Підставляючи $(5)_{[i,1]}$ в $(5)_{[i,2]}$ при $k = 4$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}, \\ c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}, \\ c_{31} = tc_{51}d_{12} + tc_{41}d_{22}, \\ tc_{41} = tc_{61}d_{12} + t^2c_{51}d_{22}, \\ t^2c_{51} = tc_{71}d_{12} + t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = tc_{11}d_{12} + t^2c_{71}d_{22}, \\ tc_{71} = tc_{21}d_{12} + tc_{11}d_{22}. \end{array} \right.$$

З 1-го, 2-го та 3-го рівняння відповідно маємо:
 $c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}$, $c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}$,
 $c_{31} = tc_{51}d_{12} + tc_{41}d_{22}$, з останнього рівняння
оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} = c_{21}d_{12} + c_{11}d_{22} + t^2c'_{71}$
($c'_{71} \in K$). Після підстановки отримаємо:

$$\begin{cases} tc_{41} = tc_{61}d_{12} + t^2c_{51}d_{22}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{41}d_{12}^3 + t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = 0. \end{cases}$$

З 3-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ одержуємо
 $c_{61} \in tK$, з 1-го рівняння, оскільки $t \neq 0$,
 $c_{61} \in tK$, одержуємо $c_{41} \in tK$, що неможливо.

Підставляючи (5)_[i,1] в (5)_[i,1] при $k = 5$
одержимо:

$$\begin{cases} c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}, \\ c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}, \\ c_{31} = tc_{51}d_{12} + tc_{41}d_{22}, \\ c_{41} = tc_{61}d_{12} + tc_{51}d_{22}, \\ tc_{51} = tc_{71}d_{12} + t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = tc_{11}d_{12} + t^2c_{71}d_{22}, \\ tc_{71} = tc_{21}d_{12} + tc_{11}d_{22} \end{cases}$$

З 1-го, 2-го, 3-го та 4-го рівняння відповідно ма-
ємо: $c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22}$, $c_{21} = tc_{41}d_{12} + tc_{31}d_{22}$,
 $c_{31} = tc_{51}d_{12} + tc_{41}d_{22}$, $c_{41} = tc_{61}d_{12} + tc_{51}d_{22}$,
з останнього рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} =$
 $c_{21}d_{12} + c_{11}d_{22} + t^2c'_{71}$ ($c'_{71} \in K$). Після підста-
новки отримаємо систему

$$\begin{cases} tc_{5,1} = t^2c_{6,1}d_{2,2} \\ t^2c_{6,1} = 0 \end{cases}$$

З 1-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо $c_{51} \in$
 tK , що неможливо. \square

Лема 2. Матриця $M(t, k, 7)$ ($1 < k < 6$) не є
подібна над K до матриці вигляду

$$N = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & td_{13} & B \\ 1 & 0 & td_{23} & \\ 0 & 1 & td_{33} & \\ \hline & & 0 & A \end{array} \right).$$

Доведення. Якщо $d_{13} \in tK$, то $d_{13} = td'_{13}$ ($d'_{13} \in$
 K) і маємо подібність над K

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & td_{13} \\ 1 & 0 & td_{23} \\ 0 & 1 & td_{33} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & 0 & t^2d'_{13} \\ 1 & td_{33} & td_{23} + t^2d_{33}^2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & td_{23} & t^2d'_{13} \\ 1 & td_{33} & t^2d_{33}^2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Тоді над кільцем K/t^2K матриця $M(t, k, 7)$ по-
дібна матриці з нульовим стовпчиком. Тоді ма-
ємо протиріччя з теоремою 2. Отже, $d_{13} \in K^*$.

Нехай для деякої оборотної матриці $C =$
(c_{ij}) порядку n над K

$$M(t, k, 7)C = CN. \quad (6)$$

Для спрощення викладок знову вважаємо, що
 $t^3 = 0$. Тоді:

$$\begin{aligned} (6)_{[1,1]}: & tc_{n1} = c_{12}, \\ (6)_{[2,1]}: & c_{11} = c_{22}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[k,1]}: & c_{k-1,1} = c_{k,2}, \\ (6)_{[k+1,1]}: & c_{k,1} = c_{k+1,2}, \\ (6)_{[k+2,1]}: & tc_{k+1,1} = c_{k+2,2}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[n,1]}: & tc_{n-1,1} = c_{n2}, \\ (6)_{[1,2]}: & tc_{n2} = c_{13}, \\ (6)_{[2,2]}: & c_{12} = c_{23}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[k+1,2]}: & c_{k2} = c_{k+1,3}, \\ (6)_{[k+2,2]}: & tc_{k+1,2} = c_{k+2,3}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[n,2]}: & tc_{n-1,2} = c_{n3}. \end{aligned}$$

Таким чином $\overline{c_{13}} = \overline{c_{k+2,3}} = \dots = \overline{c_{n3}} = 0$.

$$\begin{aligned} (6)_{[1,3]}: & tc_{n3} = tc_{11}d_{13} + tc_{12}d_{23} + tc_{13}d_{33}, \\ (6)_{[2,3]}: & c_{13} = tc_{21}d_{13} + tc_{22}d_{23} + tc_{23}d_{33}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[k+1,3]}: & c_{k3} = tc_{k+1,1}d_{13} + tc_{k+1,2}d_{23} + tc_{k+1,3}d_{33}, \\ (6)_{[k+2,3]}: & tc_{k+1,3} = tc_{k+2,1}d_{13} + tc_{k+2,2}d_{23} + tc_{k+2,3}d_{33}, \\ & \dots\dots\dots \\ (6)_{[n,3]}: & tc_{n-1,3} = tc_{n1}d_{13} + tc_{n2}d_{23} + tc_{n3}d_{33}. \end{aligned}$$

Таким чином $\overline{c_{13}} = \dots = \overline{c_{k3}} = \overline{c_{k+2,3}} = \dots =$
 $\overline{c_{n3}} = 0$. В силу оборотності детермінанта ма-
триці \overline{C} $c_{k+1,3} = c_{k2} = c_{k-1,1} \in K^*$.

Підставляючи (6)_[i,1] в (6)_[i,2], а потім отри-
мані рівності в (6)_[i,3] при $k = 2$ одержимо:

$$\begin{cases} 0 = tc_{61}d_{13} + t^2c_{51}d_{23}, \\ 0 = tc_{71}d_{13} + t^2c_{61}d_{23}, \\ 0 = tc_{11}d_{13} + t^2c_{71}d_{23}, \\ tc_{11} = tc_{41}d_{13} + t^2c_{31}d_{23} + t^2c_{21}d_{33}, \\ t^2c_{21} = tc_{51}d_{13} + t^2c_{41}d_{23}, \\ t^2c_{61} = tc_{21}d_{13} + tc_{11}d_{23} + t^2c_{71}d_{33}, \\ tc_{71} = tc_{31}d_{13} + tc_{21}d_{23} + tc_{11}d_{33} \end{cases}$$

З 3-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо
 $c_{11}d_{13} \in tK$, що неможливо, бо $c_{11}, d_{13} \in K^*$.

Підставляючи (6)_[i,1] в (6)_[i,2], а потім отри-
мані рівності в (6)_[i,3] при $k = 3$ одержимо:

$$\begin{cases} 0 = tc_{71}d_{13} + t^2c_{61}d_{23}, \\ 0 = tc_{11}d_{13} + t^2c_{71}d_{23}, \\ c_{11} = tc_{41}d_{13} + tc_{31}d_{23} + tc_{21}d_{33}, \\ tc_{21} = tc_{51}d_{13} + t^2c_{41}d_{23} + t^2c_{31}d_{33}, \\ t^2c_{31} = tc_{61}d_{13} + t^2c_{51}d_{23}, \\ t^2c_{61} = tc_{21}d_{13} + tc_{11}d_{23} + t^2c_{71}d_{33}, \\ tc_{71} = tc_{31}d_{13} + tc_{21}d_{23} + tc_{11}d_{33}. \end{cases}$$

З 1-го рівняння $c_{11} \in tK$. Тоді з 6-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо $c_{21}d_{13} \in tK$, що неможливо, бо $c_{21}, d_{13} \in K^*$.

Підставляючи (6)_[i,1] в (6)_[i,2], а потім отримані рівності в (6)_[i,3] при $k = 4$ одержимо:

$$\begin{cases} 0 = tc_{11}d_{13} + t^2c_{71}d_{23}, \\ c_{11} = tc_{41}d_{13} + tc_{31}d_{23} + tc_{21}d_{33}, \\ c_{21} = tc_{51}d_{13} + tc_{41}d_{23} + tc_{31}d_{33}, \\ tc_{31} = tc_{61}d_{13} + t^2c_{51}d_{23} + t^2c_{41}d_{33}, \\ t^2c_{41} = tc_{71}d_{13} + t^2c_{61}d_{23}, \\ t^2c_{61} = tc_{21}d_{13} + tc_{11}d_{23} + t^2c_{71}d_{33}, \\ tc_{71} = tc_{31}d_{13} + tc_{21}d_{23} + tc_{11}d_{33}. \end{cases}$$

З 2-го та 3-го рівняння відповідно маємо: $c_{11} = tc_{41}d_{13} + tc_{31}d_{23} + tc_{21}d_{33}$, $c_{21} = tc_{51}d_{13} + tc_{41}d_{23} + tc_{31}d_{33}$, з останнього рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} = c_{31}d_{13} + c_{21}d_{23} + c_{11}d_{33} + t^2c'_{71}$ ($c'_{71} \in K$). Після підстановки отримаємо систему

$$\begin{cases} 0 = t^2c_{41}d_{13}^2 + 2t^2c_{31}d_{13}d_{23}, \\ tc_{31} = tc_{61}d_{13} + t^2c_{51}d_{23} + t^2c_{41}d_{33}, \\ t^2c_{41} = tc_{31}d_{13}^2 + t^2c_{61}d_{23} + t^2c_{51}d_{13}^2d_{23} + \\ t^2c_{41}d_{13}d_{23}^2 + t^2c_{41}d_{13}^2d_{33} + \\ 2t^2c_{31}d_{13}d_{23}d_{33}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{51}d_{13}^2 + 2t^2c_{41}d_{13}d_{23} + t^2c_{31}d_{23}^2 + \\ 2t^2c_{31}d_{13}d_{33}. \end{cases}$$

З 3-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо $c_{31}d_{13}^2 \in tK$, що неможливо, бо $c_{31}, d_{13} \in K^*$.

Підставляючи (6)_[i,1] в (6)_[i,2], а потім отримані рівності в (6)_[i,3] при $k = 5$ одержимо:

$$\begin{cases} c_{11} = tc_{41}d_{13} + tc_{31}d_{23} + tc_{21}d_{33}, \\ c_{21} = tc_{51}d_{13} + tc_{41}d_{23} + tc_{31}d_{33}, \\ c_{31} = tc_{61}d_{13} + tc_{51}d_{23} + tc_{41}d_{33}, \\ tc_{41} = tc_{71}d_{13} + t^2c_{61}d_{23} + t^2c_{51}d_{33}, \\ t^2c_{51} = tc_{11}d_{13} + t^2c_{71}d_{23}, \\ t^2c_{61} = tc_{21}d_{13} + tc_{11}d_{23} + t^2c_{71}d_{33}, \\ tc_{71} = tc_{31}d_{13} + tc_{21}d_{23} + tc_{11}d_{33} \end{cases}$$

З 1-го, 2-го та 3-го рівняння відповідно маємо: $c_{11} = tc_{41}d_{13} + tc_{31}d_{23} + tc_{21}d_{33}$, $c_{21} = tc_{51}d_{13} + tc_{41}d_{23} + tc_{31}d_{33}$, $c_{31} = tc_{61}d_{13} + tc_{51}d_{23} + tc_{41}d_{33}$, з останнього рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ $c_{71} =$

$c_{31}d_{13} + c_{21}d_{23} + c_{11}d_{33} + t^2c'_{71}$ ($c'_{71} \in K$). Після підстановки отримаємо систему

$$\begin{cases} tc_{41} = t^2c_{61}d_{13}^3 + t^2c_{61}d_{23} + 2t^2c_{51}d_{13}^2d_{23} + \\ t^2c_{41}d_{13}d_{23}^2 + t^2c_{51}d_{33} + 2t^2c_{41}d_{13}^2d_{33}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{41}d_{13}^2, \\ t^2c_{61} = t^2c_{51}d_{13}^2 + 2t^2c_{41}d_{13}d_{23}. \end{cases}$$

З 1-го рівняння оскільки $t \neq 0$ одержуємо $c_{41} \in tK$, що неможливо. \square

Лема 3. Матриця $M(t, k, 7)$ ($1 < k < 6$) не є подібна над K для жодного $d_{12} \in K^*$ до матриці вигляду

$$N = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & \boxed{td_{12}} & td_{13} & \\ 1 & td_{22} & td_{23} & B \\ 0 & td_{32} & td_{33} & \\ \hline & & 0 & A \end{array} \right).$$

Доведення. Нехай для деякої оборотньої матриці $C = (c_{ij})$ порядку n над K , для деякого k ($1 < k < 6$) і $d_{12} \in K^*$

$$M(t, k, 7)C = CN. \quad (7)$$

Для спрощення викладок знову вважаємо, що $t^3 = 0$. Тоді:

$$\begin{aligned} (7)_{[1,1]}: & \quad tc_{n1} = c_{12}, \\ (7)_{[2,1]}: & \quad c_{11} = c_{22}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[k,1]}: & \quad c_{k-1,1} = c_{k,2}, \\ (7)_{[k+1,1]}: & \quad c_{k,1} = c_{k+1,2}, \\ (7)_{[k+2,1]}: & \quad tc_{k+1,1} = c_{k+2,2}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[n,1]}: & \quad tc_{n-1,1} = c_{n2}. \end{aligned}$$

Таким чином $\overline{c_{12}} = \overline{c_{k+2,2}} = \dots = \overline{c_{n2}} = 0$.

$$\begin{aligned} (7)_{[1,2]}: & \quad tc_{n2} = tc_{11}d_{12} + tc_{12}d_{22} + tc_{13}d_{32}, \\ (7)_{[2,2]}: & \quad c_{12} = tc_{21}d_{12} + tc_{22}d_{22} + tc_{23}d_{32}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[k+1,2]}: & \quad c_{k2} = tc_{k+1,1}d_{12} + tc_{k+1,2}d_{22} + tc_{k+1,3}d_{32}, \\ (7)_{[k+2,2]}: & \quad tc_{k+1,2} = tc_{k+2,1}d_{12} + tc_{k+2,2}d_{22} + tc_{k+2,3}d_{32}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[n,2]}: & \quad tc_{n-1,2} = tc_{n1}d_{12} + tc_{n2}d_{22} + tc_{n3}d_{32}. \end{aligned}$$

Таким чином $\overline{c_{12}} = \dots = \overline{c_{k2}} = \overline{c_{k+2,2}} = \dots = \overline{c_{n2}} = 0$. Крім того,

$$\begin{aligned} (7)_{[1,3]}: & \quad tc_{n3} = tc_{11}d_{13} + tc_{12}d_{23} + tc_{13}d_{33}, \\ (7)_{[2,3]}: & \quad c_{13} = tc_{21}d_{13} + tc_{22}d_{23} + tc_{23}d_{33}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[k+1,3]}: & \quad c_{k3} = tc_{k+1,1}d_{13} + tc_{k+1,2}d_{23} + tc_{k+1,3}d_{33}, \\ (7)_{[k+2,3]}: & \quad tc_{k+1,3} = tc_{k+2,1}d_{13} + tc_{k+2,2}d_{23} + tc_{k+2,3}d_{33}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[n,3]}: & \quad tc_{n-1,3} = tc_{n1}d_{13} + tc_{n2}d_{23} + tc_{n3}d_{33}. \end{aligned}$$

Також отримуємо $\overline{c_{13}} = \dots = \overline{c_{k3}} = 0$.

Через додавання до 3-го стовпця 2-го стовпця домноженого на $-td_{12}^{-1}d_{13}$ разом з додавання до 2-го рядка 3-го рядка домноженого на $td_{12}^{-1}d_{13}$ маємо подібність матриць над K

$$\begin{pmatrix} 0 & td_{12} & td_{13} \\ 1 & td_{22} & td_{23} \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & td_{12} & 0 \\ 1 & td'_{22} & td'_{23} \\ 0 & td_{32} & td'_{33} \end{pmatrix}$$

для деяких $d'_{22}, d'_{23}, d'_{33} \in K$. Не зменшуючи загальності, можна вважати, що $d_{13} = 0$. Тоді

$$\begin{aligned} (7)_{[1,3]}: & \quad tc_{n3} = tc_{12}d_{23} + tc_{13}d_{33}, \\ (7)_{[k+2,3]}: & \quad tc_{k+1,3} = tc_{k+2,2}d_{23} + tc_{k+2,3}d_{33}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[n,3]}: & \quad tc_{n-1,3} = tc_{n2}d_{23} + tc_{n3}d_{33}. \end{aligned}$$

Оскільки $\overline{c_{12}} = \overline{c_{13}} = 0$, $t \neq 0$, то з $(7)_{[1,3]}$ $\overline{c_{n3}} = 0$. Оскільки $\overline{c_{n2}} = \overline{c_{n3}} = 0$, $t \neq 0$, то з $(7)_{[n,3]}$ $\overline{c_{n-1,3}} = 0$. Нехай $k+1 < i < n$ і $\overline{c_{i3}} = 0$. Враховуючи, що $i \neq k+1$ $\overline{c_{i,2}} = 0$ з $(7)_{[i,3]}$ $tc_{i-1,3} = tc_{i2}d_{23} + tc_{i3}d_{33}$ одержимо $\overline{c_{i-1,3}} = 0$. Таким чином $\overline{c_{k+1,3}} = \dots = \overline{c_{n3}} = 0$. Отже, $\overline{c_{13}} = \dots = \overline{c_{k3}} = \overline{c_{k+1,3}} = \dots = \overline{c_{n3}} = 0$. Що суперечить оборотності $\det \overline{C}$. \square

Лема 4. Матриця $M(t, k, 7)$ ($1 < k < 6$) не є подібна над K для жодного $d_{12} \in tK$ до матриці вигляду

$$N = \left(\begin{array}{ccc|c} 0 & \boxed{td_{12}} & td_{13} & B \\ 1 & td_{22} & td_{23} & \\ 0 & td_{32} & td_{33} & \\ \hline & 0 & & A \end{array} \right).$$

Доведення. Нехай для деякої оборотної матриці $C = (c_{ij})$ порядку n над K , для деякого k ($1 < k < 6$) і $d_{12} \in K^*$ має місце (7). Легко бачити подібність матриць над K

$$\begin{pmatrix} 0 & td_{12} & td_{13} \\ 1 & td_{22} & td_{23} \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & td_{12} + t^2 d_{23} d_{32} & td_{13} + t^2 d_{23} d_{33} \\ 1 & td_{22} & 0 \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} td_{22} & td_{12} + t^2 d_{23} d_{32} + t^2 d_{22}^2 & td_{13} + t^2 d_{23} d_{33} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix}.$$

Якщо $\begin{vmatrix} d_{12} & d_{13} \\ d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} \in tK$, тоді над кільцем K/t^2K матриця $M(t, k, 7)$ подібна матриці з нульовим стовпчиком, що за теоремою 2 неможливе. Отже, $\begin{vmatrix} d_{12} & d_{13} \\ d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} \in K^*$. Тоді $d_{12} \in K^*$ або $d_{32} \in K^*$.

Якщо $d_{12} \in tK$, то $d_{32} \in K^*$. Через додавання до 3-го стовпця 2-го домноженого на $-td_{32}^{-1}d_{33}$ разом з додавання до 2-го рядка 3-го домноженого на $td_{32}^{-1}d_{33}$ маємо подібність над K

$$\begin{pmatrix} 0 & td_{12} & td_{13} \\ 1 & td_{22} & td_{23} \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & td_{12} & td'_{13} \\ 1 & td'_{22} & td'_{23} \\ 0 & td_{32} & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 0 & td_{12} + t^2 d'_{23} d_{32} & td'_{13} \\ 1 & td'_{22} & 0 \\ 0 & td_{32} & 0 \end{pmatrix}$$

для деяких $d'_{22}, d'_{13}, d'_{23} \in K$. Не зменшуючи загальності, можна вважати, що $d_{23} = d_{33} = 0$, тоді враховуючи, що $\begin{vmatrix} d_{12} & d_{13} \\ d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} \in K^*$, $d_{13} \in K^*$.

Для спрощення викладок знову вважаємо, що $t^3 = 0$. Як і при доведенні леми 3 $\overline{c_{12}} = \dots = \overline{c_{k2}} = \overline{c_{k+2,2}} = \dots = \overline{c_{n2}} = 0$. В силу оборотності детермінанта матриці \overline{C} $c_{k+1,2} = c_{k1} \in K^*$.

Враховуючи, що $d_{23} = d_{33} = 0$ вказані рівності спрощуються

$$\begin{aligned} (7)_{[1,3]}: & \quad tc_{n3} = tc_{11}d_{13}, \\ (7)_{[2,3]}: & \quad c_{13} = tc_{21}d_{13}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[k+1,3]}: & \quad c_{k3} = tc_{k+1,1}d_{13}, \\ (7)_{[k+2,3]}: & \quad tc_{k+1,3} = tc_{k+2,1}d_{13}, \\ & \quad \dots\dots\dots \\ (7)_{[n,3]}: & \quad tc_{n-1,3} = tc_{n1}d_{13}. \end{aligned}$$

Підставляючи (7)_[i,1] в (7)_[i,2] разом з (7)_[i,3] при $k = 2$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32} + t^2c_{31}d'_{12}, \\ c_{13} = tc_{21}d_{13}, \\ tc_{21} = t^2c_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}, \\ c_{23} = tc_{31}d_{13}, \\ t^2c_{31} = t^2c_{41}d_{22} + tc_{53}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ tc_{33} = tc_{41}d_{13}, \\ t^2c_{41} = t^2c_{51}d_{22} + tc_{63}d_{32} + t^2c_{61}d'_{12}, \\ tc_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{61}d_{22} + tc_{73}d_{32} + t^2c_{71}d'_{12}, \\ tc_{53} = tc_{61}d_{13}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{71}d_{22} + tc_{13}d_{32} + t^2c_{11}d'_{12}, \\ tc_{63} = tc_{71}d_{13}, \\ tc_{71} = tc_{11}d_{22} + tc_{23}d_{32} + t^2c_{21}d'_{12}, \\ tc_{73} = tc_{11}d_{13}. \end{array} \right.$$

З 1-го, 2-го та 4-го рівняння відповідно одержимо $c_{11} = tc_{31}d_{12} + tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32}$, $c_{13} = tc_{21}d_{13}$, $c_{23} = tc_{31}d_{13}$. З 12-го, 13-го та 14-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ відповідно одержуємо $c_{63} = c_{71}d_{13} + t^2c'_{63}$, $c_{71} = c_{11}d_{22} + c_{23}d_{32} + tc_{21}d'_{12} + t^2c'_{71}$, $c_{73} = c_{11}d_{13} + t^2c'_{73}$ для деяких $c'_{63}, c'_{71}, c'_{73} \in K$. Після підстановки одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} tc_{21} = t^2c_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}, \\ t^2c_{31} = t^2c_{41}d_{22} + tc_{53}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ tc_{33} = tc_{41}d_{13}, \\ t^2c_{41} = t^2c_{51}d_{22} + t^2c_{21}d_{13}d_{22}d_{32} + t^2c_{31}d_{13}^2d_{32}^2 + \\ \quad t^2c_{33}d_{13}d_{22}d_{32}^2 + t^2c_{61}d'_{12} + t^2c_{21}d_{13}d_{32}d'_{12}, \\ tc_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{61}d_{22} + t^2c_{21}d_{13}d_{22}d_{32} + t^2c_{33}d_{13}d_{32}^2, \\ tc_{53} = tc_{61}d_{13}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{21}d_{13}d_{32}. \end{array} \right.$$

З 7-го та 8-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ відповідно одержуємо $c_{53} = c_{61}d_{13} + t^2c'_{53}$, $c_{61} = c_{21}d_{13}d_{32} + tc'_{61}$ для деяких $c'_{53}, c'_{61} \in K$. Після підстановки отримаємо систему з рівнянням $t^2c_{31} = t^2c_{41}d_{22} + tc_{21}d_{13}^2d_{32}^2 + t^2d_{13}d_{32}c'_{61} + t^2c_{51}d'_{12}$. Тоді $c_{21}d_{13}^2d_{32}^2 \in tK$, що суперечить $c_{21}, d_{13}, d_{32} \in K^*$.

Підставляючи (7)_[i,1] в (7)_[i,2] разом з (7)_[i,3] при $k = 3$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32} + t^2c_{31}d'_{12}, \\ c_{13} = tc_{21}d_{13}, \\ c_{21} = tc_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}, \\ c_{23} = tc_{31}d_{13}, \\ tc_{31} = t^2c_{41}d_{22} + tc_{53}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ c_{33} = tc_{41}d_{13}, \\ t^2c_{41} = t^2c_{51}d_{22} + tc_{63}d_{32} + t^2c_{61}d'_{12}, \\ tc_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{61}d_{22} + tc_{73}d_{32} + t^2c_{71}d'_{12}, \\ tc_{53} = tc_{61}d_{13}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{71}d_{22} + tc_{13}d_{32} + t^2c_{11}d'_{12}, \\ tc_{63} = tc_{71}d_{13}, \\ tc_{71} = tc_{11}d_{22} + tc_{23}d_{32} + t^2c_{21}d'_{12}, \\ tc_{73} = tc_{11}d_{13}. \end{array} \right.$$

З 1-го, 2-го 3-го, 4-го та 6-го рівняння відповідно одержимо $c_{11} = tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32} + t^2c_{31}d'_{12}$, $c_{13} = tc_{21}d_{13}$, $c_{21} = tc_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}$, $c_{23} = tc_{31}d_{13}$, $c_{33} = tc_{41}d_{13}$. З 13-го та 14-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ відповідно одержуємо $c_{71} = c_{11}d_{22} + c_{23}d_{32} + tc_{21}d'_{12} + t^2c'_{71}$, $c_{73} = c_{11}d_{13} + t^2c'_{73}$. для деяких $c'_{71}, c'_{73} \in K$. Після підстановки одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} tc_{31} = t^2c_{41}d_{22} + tc_{61}d_{13}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ t^2c_{41} = t^2c_{51}d_{22} + tc_{63}d_{32} + t^2c_{61}d'_{12}, \\ tc_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{61}d_{22}, \\ t^2c_{61} = 0, \\ tc_{63} = t^2c_{31}d_{13}^2d_{32}. \end{array} \right.$$

З 5-го та 1-го рівняння оскільки $t^2 \neq 0$ відповідно одержуємо $c_{61} = tc'_{61}$, $c_{31} = tc_{41}d_{22} +$

$tc'_{61}d_{13}d_{32} + tc_{51}d'_{12} + tc'_{31}$ для деяких $c'_{31}, c'_{61} \in K$, що неможливо, бо $c_{31} \in K^*$.

Підставляючи (7)_[i,1] в (7)_[i,2] разом з (7)_[i,3] при $k = 4$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32} + t^2c_{31}d'_{12}, \\ c_{13} = tc_{21}d_{13}, \\ c_{21} = tc_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}, \\ c_{23} = tc_{31}d_{13}, \\ c_{31} = tc_{41}d_{22} + tc_{53}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ c_{33} = tc_{41}d_{13}, \\ tc_{41} = t^2c_{51}d_{22} + tc_{63}d_{32} + t^2c_{61}d'_{12}, \\ c_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ t^2c_{51} = t^2c_{61}d_{22} + tc_{73}d_{32} + t^2c_{71}d'_{12}, \\ tc_{53} = tc_{61}d_{13}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{71}d_{22} + tc_{13}d_{32} + t^2c_{11}d'_{12}, \\ tc_{63} = tc_{71}d_{13}, \\ tc_{71} = tc_{11}d_{22} + tc_{23}d_{32} + t^2c_{21}d'_{12}, \\ tc_{73} = tc_{11}d_{13} \end{array} \right.$$

Підставляючи 1-е та 4-е рівняння в 13-е одержимо $tc_{71} = t^2c_{21}d_{22}^2 + t^2c_{31}d_{13}d_{32} + t^2c_{33}d_{22}d_{32} + t^2c_{21}d'_{12}$. Тоді, враховуючи, що $t^2 \neq 0$, $c_{71} = tc_{21}d_{22}^2 + tc_{31}d_{13}d_{32} + tc_{33}d_{22}d_{32} + tc_{21}d'_{12} + t^2c_{73}$ ($c'_{71} \in K$). Підставляючи отримане рівняння в 12-е, одержимо $tc_{63} = t^2c_{21}d_{13}d_{22}^2 + t^2c_{31}d_{13}^2d_{32} + t^2c_{33}d_{13}d_{22}d_{32} + t^2c_{21}d_{13}d'_{12}$. Тоді, враховуючи, що $t^2 \neq 0$, $c_{63} = tc_{21}d_{13}d_{22}^2 + tc_{31}d_{13}^2d_{32} + tc_{33}d_{13}d_{22}d_{32} + tc_{21}d_{13}d'_{12} + t^2c'_{63}$; ($c'_{63} \in K$). Підставляючи отримане рівняння в 7-е, одержимо $tc_{41} \rightarrow t^2c_{51}d_{22} + t^2c_{21}d_{13}d_{22}^2d_{32} + t^2c_{31}d_{13}^2d_{32}^2 + t^2c_{33}d_{13}d_{22}d_{32}^2 + t^2c_{61}d'_{12} + t^2c_{21}d_{13}d_{32}d'_{12}$. Тоді, враховуючи, що $t^2 \neq 0$, $c_{41} \in tK$, що неможливо.

Підставляючи (7)_[i,1] в (7)_[i,2] разом з (7)_[i,3] при $k = 5$ одержимо:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_{11} = tc_{21}d_{22} + tc_{33}d_{32} + t^2c_{31}d'_{12}, \\ c_{13} = tc_{21}d_{13}, \\ c_{21} = tc_{31}d_{22} + tc_{43}d_{32} + t^2c_{41}d'_{12}, \\ c_{23} = tc_{31}d_{13}, \\ c_{31} = tc_{41}d_{22} + tc_{53}d_{32} + t^2c_{51}d'_{12}, \\ c_{33} = tc_{41}d_{13}, \\ c_{41} = tc_{51}d_{22} + tc_{63}d_{32} + t^2c_{61}d'_{12}, \\ c_{43} = tc_{51}d_{13}, \\ tc_{51} = t^2c_{61}d_{22} + tc_{73}d_{32} + t^2c_{71}d'_{12}, \\ c_{53} = tc_{61}d_{13}, \\ t^2c_{61} = t^2c_{71}d_{22} + tc_{13}d_{32} + t^2c_{11}d'_{12}, \\ tc_{63} = tc_{71}d_{13}, \\ tc_{71} = tc_{11}d_{22} + tc_{23}d_{32} + t^2c_{21}d'_{12}, \\ tc_{73} = tc_{11}d_{13}. \end{array} \right.$$

Підставляючи 1-е рівняння в 14-е одержимо $tc_{73} = t^2c_{21}d_{13}d_{22} + t^2c_{33}d_{13}d_{32}$. Тоді, враховую-

чи, що $t^2 \neq 0$, $c_{73} = tc_{21}d_{13}d_{22} + tc_{33}d_{13}d_{32} + t^2c'_{73}$ ($c'_{73} \in K$). Підставляючи отримане рівняння в 9-е одержимо $tc_{51} = t^2c_{61}d_{22} + t^2c_{21}d_{13}d_{22}d_{32} + t^2c_{33}d_{13}d'_{32} + t^2c_{71}d'_{12}$. Тоді, враховуючи, що $t^2 \neq 0$, $c_{51} \in tK$, що неможливо. \square

Теорема 3. Нехай K — комутативне локальне кільце, радикал Джексона якого tK ($t \in K$, $t^2 \neq 0$). Матриця $M(t, k, 7)$ незвідна над K для жодного k ($0 < k < 7$).

Доведення. За теоремою 1 достатньо розглянути випадки $1 < k < 6$. Припустимо матриця $M(t, k, 7)$ звідна. Тоді маємо подібність над K

$$M(t, k, 7) \sim \begin{pmatrix} D & B \\ 0 & A \end{pmatrix}, \quad (8)$$

де D — квадратна матриця порядку m . За наслідком 1 можна вважати, що $m = 2$ або $m = 3$.

Список використаних джерел

1. Бондаренко В.М. О подобии матриц над кольцом классов вычетов/ В.М. Бондаренко// Матем. сборник, “Наукова думка”, Киев. — 1976. — С. 275–277.
2. Гудивок П.М. Про незвідні модулярні зображення скінченних p -груп над комутативними локальними кільцями/ П.М. Гудивок, О.А. Тилищак// Науковий вісник Ужгородського ун-ту (Сер. матем. і інформ). — 1998. — **3**. — С. 78–83.
3. Динис Р.Ф. Про звідність матриць деякого вигляду над комутативними локальними кільцями головних ідеалів/ Р.Ф. Динис, О.А. Тилищак// Науковий вісник Ужгородського ун-ту (Сер. матем. і інформ). — 2012. — **23**, №1. — С. 57–62.
4. Bondarenko V.M. Reducibility and irreducibility of monomial matrices over commutative rings/ V.M. Bondarenko, M.Yu. Bortos, R.F. Dinis, A.A. Tylyshchak// Algebra Discrete Math., **16**, No 2, (2013), 171–187.

За теоремою 2 можна вважати, що

$$D = \begin{pmatrix} 0 & td_{13} \\ 1 & td_{23} \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & td_{13} \\ 1 & 0 & td_{23} \\ 0 & 1 & td_{33} \end{pmatrix}, \quad \text{або}$$

$$D = \begin{pmatrix} 0 & td_{12} & td_{13} \\ 1 & td_{22} & td_{23} \\ 0 & td_{32} & td_{33} \end{pmatrix}$$

для деяких $d_{ij} \in K$. У першому випадку маємо протиріччя з лемою 1, у другому випадку — з лемою 2, у третьому випадку — з лемами 3 та 4. \square

Автор щиро вдячний професору В. М. Бондаренку за увагу до роботи і цінні поради.

References

1. BONDARENKO V.M. (1976) “The similarity of matrices over rings of residue classes”, *Mathematics collection, Izdat. “Naukova Dumka”*, Kiev, pp. 275–277.
2. GUDIVOK P.M., TYLYSHCHAK A.A. (1998) “On irreducible modular representations of finite p -groups over commutative local rings”, *Nauk. Visn. Uzhgorod. Univ. (Ser. Mat.)*, **v.3**, pp. 78–83.
3. DINIS R. F., TYLYSHCHAK A. A. (2012) “On reducibility of matrixes of some type over commutative local principle ideals rings”, *Nauk. Visn. Uzhgorod. Univ. (Ser. Mat. Inform.)*, **v.23**, pp. 57–62.
4. BONDARENKO V.M., BORTOS M.YU., DINIS R.F., TYLYSHCHAK A.A. (2013) “Reducibility and irreducibility of monomial matrices over commutative rings”, *Algebra Discrete Math.*, **16** no. 2, pp. 171–187.

Надійшла до редколегії 09.03.2018

**ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ
РІВНЯННЯ,
МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА
ТА МЕХАНІКА**

УДК 519.21

Зімін О. І., магістр,
Кулініч Г. Л., д-р фіз.-мат. наук

**Про асимптотичну поведінку математичного
сподівання повної енергії гармонічного
осцилятора при випадковому збуренні**

Київський національний університет імені Тараса
Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. акад. Глушкова 4-е
e-mail: 1997zimin@ukr.net

Київський національний університет імені Тараса
Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. акад. Глушкова 4-е

O. I. Zimin, mast.,
G. L. Kulinich, Dr.Sci. (Phys.-Math.)

**About asymptotic behavior of the
mathematical expectation of the total energy of
the harmonic oscillator with random
perturbation**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-е
e-mail: 1997zimin@ukr.net

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-е

У даній статті знайдена асимптотична поведінка математичного сподівання повної енергії гармонічного осцилятора без тертя під впливом енергетичного насосу з керуючим елементом вигляду стохастичного гармонічного осцилятора без тертя зі збуренням типу «білого шуму» у резонансному і нерезонансному випадках.

Ключові слова: гармонічний осцилятор, повна енергія, білий шум.

In this article, the asymptotic behavior of the mathematical expectation of the total energy of a harmonic oscillator without friction under the influence of an energy pump with a controlling element of the form of a stochastic harmonic oscillator without friction with a white noise perturbation in resonant and non-resonant cases is found. During the analytical solving the problem of finding the mathematical expectation of the total energy of a harmonic oscillator with random perturbation, the properties of the Wiener process, the stochastic Ito integral, and the mathematical expectation of the product of stochastic integrals are used.

Key words: harmonic oscillator, total energy, white noise.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Козаченко Ю.В.

1. Вступ

Під гармонічним осцилятором без тертя при зовнішньому збуренні будемо розуміти тіло маси 1, рух якого описується диференціальним рівнянням другого порядку:

$$\begin{cases} \ddot{u}(t) + k^2 u(t) = q(t) \\ u(0) = u_0 \\ \dot{u}(0) = \dot{u}_0 \end{cases}, \quad (1)$$

де $q(t)$ – зовнішня збурна сила, u_0, \dot{u}_0 – початкові положення і швидкість осцилятора, $u(t), \dot{u}(t)$ – положення і швидкість осцилятора в момент часу $t > 0$, $k > 0$ – параметр осцилятора, $\varepsilon(t) = \frac{1}{2} [\dot{u}^2(t) + k^2 u^2(t)]$ – повна енергія осцилятора.

Відомо [10], що в детермінованих випадках:

- 1) $\varepsilon(t) = \varepsilon(0)$ при всіх $t > 0$, якщо $q(t) = 0$;

- 2) Повна енергія обмежена, якщо $q(t) = \cos \alpha t$,
 $\alpha \neq k$, і $\varepsilon(t) \sim \frac{1}{2} t^2$ при $t \rightarrow \infty$ (резонанс) при
 $\alpha = k$.

Модель гармонічного осцилятора з неперервним випадковим зовнішнім збуренням, в якому математичне сподівання $E\varepsilon(t) \sim \sqrt{t}$ при $t \rightarrow \infty$ розглядалась у [8], $E\varepsilon(t) \sim t$ у [13], $E\varepsilon(t) \sim t^\alpha, \alpha > \frac{1}{2}$ – у [11, 3], $\ln E\varepsilon(t) \sim t$ – у [1].

Фазовий «портрет» гармонічного осцилятора при випадковому зовнішньому збуренні процесом типу «білого шуму» вздовж вектора фазової швидкості осцилятора досліджувався в роботах [12, 5], під повним кутом до вектора фазової швидкості – у [4], а при випадковому збуренні процесом типу «дробового шуму» – у [6].

Означення. Вінерівський процес – гаусів процес з нульовим середнім, незалежними приростами та коваріаційною функцією $\min\{t, s\}$.

Позначається $w(t)$, $t \geq 0$.

Позначення. Стохастичний інтеграл Іто має вигляд $\int_a^b f(t)dy(t) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \sum_{i=1}^N f(t_i)[y(t_{i+1}) - y(t_i)]$, (2)

$a = t_1 < \dots < t_{N+1} = b$, де $\Delta = \max_i \{t_{i+1} - t_i\}$.

Позначення. $\dot{w}(t)$ - «похідна» від вінерівського процесу («білий шум» у формі Іто); формальний запис.

Під енергетичним насосом будемо розуміти систему, яка передає енергію з джерела до елемента. В даній роботі будемо вважати, що передача йде без втрат і кількість енергії у джерелі нескінченна. Кількість енергії, яку передає енергетичний насос, визначається керуючим елементом.

У даній роботі керуючим елементом є стохастичний гармонічний осцилятор без тертя, який задається диференціальним рівнянням з нульовими початковими умовами та збуренням типу «білого шуму».

2. Допоміжні результати.

Математичну модель гармонічного осцилятора без тертя зі збуренням $q(t)$ і нульовими початковими умовами запишемо у вигляді такої системи:

$$\begin{cases} \ddot{u}(t) + k^2 u(t) = q(t) \\ u(0) = 0, \dot{u}(0) = 0 \end{cases}$$

За допомогою методу Лагранжа (варіації довільної сталої) знаходимо

$$u(t) = \frac{1}{k} \int_0^t \sin k(t-s)q(s)ds. \quad (3)$$

Тоді повна енергія осцилятора буде виглядати так:

$$\begin{aligned} \varepsilon(t) &= \frac{1}{2}(\dot{u}^2(t) + k^2 u^2(t)) = \int_0^t (\dot{u}(s)\ddot{u}(s) + k^2 u(s)\dot{u}(s))ds = \\ &= \left| \dot{u}(t) = q(t) - k^2 u(t) \right| = \int_0^t \dot{u}(s)q(s)ds = \end{aligned}$$

$$= \left| \dot{u}(t) = \int_0^t \cos k(t-s)q(s)ds \right| =$$

$$= \int_0^t \int_0^s \cos k(s-s_1)q(s_1)ds_1q(s)ds \quad (4)$$

Розглянемо деякі властивості вінерівського процесу: $w(t) \sim N(0, t)$, $w(t_2) - w(t_1) \sim N(0, t_2 - t_1)$,

$$Ew(t) = 0, \quad (5)$$

$$w(0) = 0, \quad (6)$$

$$E(w(t_2) - w(t_1))(w(t_4) - w(t_3)) = 0, \quad 0 \leq t_1 \leq t_2 \leq t_3 \leq t_4 \quad (7)$$

$$\text{cov}(t, s) \stackrel{\text{def}}{=} E[(w(t) - Ew(t))(w(s) - Ew(s))] \stackrel{(5)}{=} Ew(t)w(s) = E[(w(\min\{t, s\}) - w(0))^2] +$$

$$+ E[(w(\min\{t, s\}) - w(0))(w(\max\{t, s\}) - w(\min\{t, s\}))] \stackrel{(6,7)}{=}$$

$$= E[w(\min\{t, s\})^2] = \min\{t, s\}, \quad t, s \geq 0. \quad (8)$$

Розглянемо деякі властивості інтегралу Іто:

Проста функція, що апроксимує $f(t)$, має

$$\text{вигляд } f_N(t) = \sum_{i=1}^N f(t_i) \cdot 1_{\{t_i \leq t < t_{i+1}\}}(t). \quad (9)$$

$y(t)$ має необмежену варіацію, тому інтеграл Іто не можна розуміти у сенсі Лебега-Стільбеса.

Інтеграл Іто адитивний [9, с. 21]:

$$\int_0^{t''} f(t)dy(t) = \int_0^{t'} f(t)dy(t) + \int_{t'}^{t''} f(t)dy(t), \quad 0 \leq t' \leq t'' \quad (10)$$

$$E \left[\left(\int_0^s f(s_1)dw(s_1) \right) \cdot \left(\int_0^s g(s_2)dw(s_2) \right) \right] =$$

$$= \begin{cases} \text{за означенням інтеграла Іто} \\ 0 = t_1^1 < \dots < t_{N+1}^1 = s \quad - \text{розб. I інт. Іто} \\ 0 = t_1^2 < \dots < t_{N+1}^2 = s \quad - \text{розб. II інт. Іто} \\ \{t_i^3\}_{i=1}^{N+1} = \{t_i^1\}_{i=1}^{N+1} \cup \{t_i^2\}_{i=1}^{N+1} \quad - \text{p. для обох} \\ N = N_3, \quad i = i_3, \quad \Delta = \max_i |t_{i+1}^3 - t_i^3| \geq 0 \end{cases}$$

$$\stackrel{(2,9)}{=} \lim_{\Delta \rightarrow 0} E \left[\left(\sum_{i=1}^N f(t_i)[w(t_{i+1}) - w(t_i)] \right) \cdot \right.$$

$$\left. \left(\sum_{j=1}^N g(t_j)[w(t_{j+1}) - w(t_j)] \right) \right] =$$

$$= \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ (N \rightarrow \infty)}} \left(\sum_{i=1}^N f(t_i)g(t_i)E[w(t_{i+1}) - w(t_i)]^2 + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^N f(t_i)g(t_j)E[w(t_{i+1}) - w(t_i)][w(t_{j+1}) - w(t_j)] \right) =$$

$$= \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ (N \rightarrow \infty)}} \left(\sum_{i=1}^N f(t_i)g(t_i)[t_{i+1} - t_i] + 0 \right) = \int_0^s f(s_3)g(s_3)ds_3 \quad (11)$$

$$E \left[\left(\int_0^{s'} f(s_1)dw(s_1) \right) \cdot \left(\int_{s'}^s g(s_2)dw(s_2) \right) \right] =$$

$$\left. \begin{array}{l} 0 < s' < s \\ \text{за означенням інтеграла Іто} \\ 0 = t_1^1 < \dots < t_{N_1+1}^1 = s' - \text{розб. I інт. Іто} \\ s' = t_1^2 < \dots < t_{N_2+1}^2 = s - \text{розб. II інт. Іто} \\ = \left\{ t_3^3 \right\}_{i=1}^{N_3+1} = \left\{ t_1^1 \right\}_{i=1}^{N_1+1} \cup \left\{ t_2^2 \right\}_{i=1}^{N_2+1} - \text{р. для обох} \\ \text{тут } N_3 + 1 = (N_1 + 1) + (N_2 + 1) - 1, \\ N_3 = N_1 + N_2 \text{ (одна спільна т. } s'), \\ \Delta = \max_i |t_{i+1}^3 - t_i^3| \geq 0 \end{array} \right| =$$

$$\stackrel{(2,9)}{=} \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ (N_1, N_2 \rightarrow \infty)}} E \left[\left(\sum_{i=1}^{N_1} f(t_i)[w(t_{i+1}) - w(t_i)] \right) \cdot \sum_{j=N_1+1}^{N_1+N_2} g(t_j)[w(t_{j+1}) - w(t_j)] \right) =$$

$$= \lim_{\substack{\Delta \rightarrow 0 \\ (N_1, N_2 \rightarrow \infty)}} \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=N_1+1}^{N_1+N_2} f(t_i)g(t_j) \cdot E[w(t_{i+1}) - w(t_i)][w(t_{j+1}) - w(t_j)] = 0 \quad (12)$$

Останні дві властивості виконуються за умови, що в обох інтегралах один і той самий вінерівський процес. В подальшому ця умова виконується, бо ми використовуємо лише один вінерівський процес. Більше властивостей вінерівського процесу та інтегралу Іто розглянуто, наприклад, в [9 с. 18-22; 2].

3. Основні результати.

У даній роботі досліджується асимптотична поведінка математичного сподівання повної енергії гармонічного осцилятора без тертя під впливом енергетичного насосу з керуючим елементом вигляду стохастичного гармонічного осцилятора без тертя зі збуренням типу «білого шуму».

Теорема 1. Нехай $u_1(t)$ - розв'язок системи рівнянь задачі

$$\begin{cases} \ddot{u}_1(t) + k_1^2 u_1(t) = u_2(t) \\ u_1(0) = 0, \dot{u}_1(0) = 0 \end{cases} - \text{I} - \text{осцилятор}$$

$$\begin{cases} \ddot{u}_2(t) + k_2^2 u_2(t) = \dot{w}(t) \\ u_2(0) = 0, \dot{u}_2(0) = 0 \end{cases} - \text{II} - \text{осцилятор}$$

$k_1, k_2 > 0, t > 0$, де $\dot{w}(t)$ - процес типу «білого шуму». Тоді

$$1) \quad k_1 \neq k_2 \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E\varepsilon_1(t)}{t} = \frac{3k_2^2 + k_1^2}{4k_2^2(k_1^2 - k_2^2)^2}$$

$$2) \quad k_1 = k_2 \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E\varepsilon_1(t)}{t^3} = \frac{1}{24k^2}$$

Доведення. Запишемо формально повну енергію першого осцилятора

$$\varepsilon_1(t) = \int_0^t \int_0^s \cos k_1(s-s_1)u_2(s_1)ds_1 u_2(s)ds =$$

$$= \int_0^t \int_0^s \cos k_1(s-s_1) \left(\frac{1}{k_2} \int_0^s \sin k_2(s_1-s_2)\dot{w}(s_2)ds_2 \right) ds_1 \cdot$$

$$\cdot \left(\frac{1}{k_2} \int_0^s \sin k_2(s-s_3)\dot{w}(s_3)ds_3 \right) ds =$$

$$= \frac{1}{k_2^2} \int_0^t \int_0^s \cos k_1(s-s_1) \left(\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1-s_2)dw(s_2) \right) \cdot$$

$$\cdot \left(\int_0^s \sin k_2(s-s_3)dw(s_3) \right) ds_1 ds, \quad (13)$$

де $\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1-s_2)dw(s_2)$ та $\int_0^s \sin k_2(s-s_3)dw(s_3)$ -

інтеграли Іто.

Тоді математичне сподівання повної енергії першого осцилятора буде:

$$E\varepsilon_1(t) \stackrel{(13)}{=} \frac{1}{k_2^2} E \left[\int_0^t \int_0^s \cos k_1(s-s_1) \left(\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1-s_2)dw(s_2) \right) \cdot \right.$$

$$\cdot \left. \left(\int_0^s \sin k_2(s-s_3)dw(s_3) \right) ds_1 ds \right] = \frac{1}{k_2^2} \int_0^t \int_0^s \cos k_1(s-s_1) \cdot$$

$$\begin{aligned} & \cdot E \left[\left(\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1 - s_2) dw(s_2) \right) \cdot \left(\int_0^s \sin k_2(s - s_3) dw(s_3) \right) \right] ds_1 ds = \\ & \stackrel{0 < s_1 < s}{=} \stackrel{(10)}{=} \frac{1}{k_2^2} \int_0^t \int_0^s \cos k_1(s - s_1) \left(E \left[\left(\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1 - s_2) dw(s_2) \right) \cdot \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left(\int_0^s \sin k_2(s - s_3) dw(s_3) \right) \right] + E \left[\left(\int_0^{s_1} \sin k_2(s_1 - s_2) dw(s_2) \right) \cdot \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left(\int_{s_1}^s \sin k_2(s - s_3) dw(s_3) \right) \right] \right) \right] ds_1 ds \stackrel{(12,13)}{=} \end{aligned}$$

$$= \frac{1}{k_2^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} \cos k_1(s - s_1) \sin k_2(s - s_2) \sin k_2(s_1 - s_2) ds_2 ds_1 ds =$$

1) Нерезонансний випадок $k_1 \neq k_2$

$$= \frac{1}{2k_2^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} \cos k_1(s - s_1) (\cos k_2(s_1 - s) - \cos k_2(s + s_1 - 2s_2)) ds_2 ds_1 ds =$$

$$= \frac{1}{2k_2^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} (\cos k_1(s - s_1) \cos k_2(s_1 - s) - \cos k_1(s - s_1) \cos k_2(s + s_1 - 2s_2)) ds_2 ds_1 ds =$$

$$= \frac{1}{4k_2^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} (\cos(k_1 + k_2)(s - s_1) + \cos(k_1 - k_2)(s - s_1) - \cos((k_2 + k_1)s + (k_2 - k_1)s_1 - 2k_2s_2) - \cos((k_1 - k_2)s - (k_2 + k_1)s_1 + 2k_2s_2)) ds_2 ds_1 ds =$$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{4k_2^2} \int_0^t \int_0^s (s_1 \cos(k_1 + k_2)(s - s_1) - 0 + s_1 \cos(k_1 - k_2)(s - s_1) - 0 + \\ & + \frac{1}{2k_2} \sin((k_2 + k_1)s + (k_2 - k_1)s_1 - 2k_2s_1) - \frac{1}{2k_2} \sin((k_2 + k_1)s + (k_2 - k_1)s_1) - \\ & - \frac{1}{2k_2} \sin((k_1 - k_2)s - (k_2 + k_1)s_1 + 2k_2s_1) + \frac{1}{2k_2} \sin((k_1 - k_2)s - (k_2 + k_1)s_1)) ds_1 ds = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{4k_2^2} \int_0^t \int_0^s (s_1 \cos(k_1 + k_2)(s - s_1) + s_1 \cos(k_1 - k_2)(s - s_1) + \\ & + \frac{1}{2k_2} \sin(k_2 + k_1)(s - s_1) - \frac{1}{2k_2} \sin((k_2 + k_1)s + (k_2 - k_1)s_1) - \\ & - \frac{1}{2k_2} \sin(k_1 - k_2)(s - s_1) + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & + \frac{1}{2k_2} \sin((k_1 - k_2)s - (k_2 + k_1)s_1)) ds_1 ds = \\ & = \frac{1}{4k_2^2} \int_0^t \left(-\frac{1}{k_1 + k_2} s \cdot \sin(k_1 + k_2)(s - s) + \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} \cos(k_1 + k_2)(s - s) - \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} \cos(k_1 + k_2)s - \right. \\ & \left. - \frac{1}{k_1 - k_2} s \cdot \sin(k_1 - k_2)(s - s) + \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} \cos(k_1 - k_2)(s - s) - \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} \cos(k_1 - k_2)s + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos(k_1 + k_2)(s - s) - \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos(k_1 + k_2)s - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \cos(k_1 - k_2)(s - s) + \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \cos(k_1 - k_2)s + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos((k_1 - k_2)s - (k_1 + k_2)s) - \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos(k_1 - k_2)s \right) ds = \\ & = \frac{1}{4k_2^2} \int_0^t \left(\frac{1}{(k_1 + k_2)^2} - \frac{1}{(k_1 + k_2)^2} \cos(k_1 + k_2)s + \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} - \right. \\ & \left. - \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} \cos(k_1 - k_2)s + \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} - \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos(k_1 + k_2)s - \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \cos 2k_2s + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \cos(k_1 + k_2)s - \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} + \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \cos(k_1 - k_2)s + \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos 2k_2s - \right. \\ & \left. - \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} \cos(k_1 - k_2)s \right) ds = \\ & = \frac{1}{4k_2^2} \left(\left(\frac{1}{(k_1 + k_2)^2} + \frac{1}{(k_1 - k_2)^2} + \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)} - \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)} \right) t + \left(-\frac{1}{(k_1 + k_2)^3} - \frac{1}{2k_2(k_1 + k_2)^2} + \frac{1}{2k_2(k_1 - k_2)(k_1 + k_2)} \right) \sin(k_1 + k_2)t + \left(\frac{1}{4k_2^2(k_1 + k_2)} - \right. \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{4k_2^2(k_1-k_2)} \Big) \sin 2k_2 t + \left(-\frac{1}{(k_1-k_2)^3} + \frac{1}{2k_2(k_1-k_2)^2} - \right. \\ & \quad \left. -\frac{1}{2k_2(k_1+k_2)(k_1-k_2)} \right) \sin(k_1-k_2)t \Big) = \\ & = \frac{3k_2^2+k_1^2}{4k_2^2(k_1^2-k_2^2)^2} \cdot t + \frac{1}{2k_2(k_1+k_2)^3(k_1-k_2)} \sin(k_1+k_2)t - \\ & - \frac{1}{8k_2^3(k_1^2-k_2^2)} \sin 2k_2 t - \frac{1}{2k_2(k_1-k_2)^3(k_1+k_2)} \sin(k_1-k_2)t \\ & \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E\varepsilon_1(t)}{t} = \frac{3k_2^2+k_1^2}{4k_2^2(k_1^2-k_2^2)^2} \end{aligned}$$

2) Резонансний випадок $k_1 = k_2 = k$

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{k^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} \cos k(s-s_1) \sin k(s-s_2) \sin k(s_1-s_2) ds_2 ds_1 ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \int_0^s \int_0^{s_1} (\cos 2k(s-s_1) + 1 - \cos 2k(s-s_2) - \\ & \quad - \cos 2k(s_2-s_1)) ds_2 ds_1 ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \int_0^s \left(s_1 \cos 2k(s-s_1) - 0 + s_1 - 0 + \frac{1}{2k} \sin 2k(s-s_1) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2k} \sin 2ks - \frac{1}{2k} \sin 2k(s_1-s_1) + \frac{1}{2k} \sin 2k(-s_1) \right) ds_1 ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \int_0^s \left(s_1 \cos 2k(s-s_1) + s_1 + \frac{1}{2k} \sin 2k(s-s_1) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2k} \sin 2ks - \frac{1}{2k} \sin 2k(s_1-s_1) + \frac{1}{2k} \sin 2k(-s_1) \right) ds_1 ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \int_0^s \left(s_1 \cos 2k(s-s_1) + s_1 + \frac{1}{2k} \sin 2k(s-s_1) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2k} \sin 2ks - \frac{1}{2k} \sin 2ks_1 \right) ds_1 ds = \end{aligned}$$

Список використаних джерел

1. Бандерський М. М., Пастур Л. А. Об асимптотике уравнений 2-го порядка со случайным коэффициентом // Теория функций, функцион. анализ и их прил. – 1975. – Вып. 22. – С. 3-14.
2. Гихман И. И., Скороход А. В. Введение в теорию случайных процессов. – М.: Наука, 1965. – 654с.
3. Дивнич М. Т., Кіровський Д. Ю., Єршов А. В. Асимптотичний аналіз математичного сподівання повної енергії випадкового гармонічного осцилятора. – Вісн. Київ. ун-ту.

$$\begin{aligned} & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \left(-\frac{1}{2k} s \cdot \sin 2k(s-s) + \frac{1}{4k^2} \cos 2k(s-s) - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{4k^2} \cos 2ks + \frac{s^2}{2} + \frac{1}{4k^2} \cos 2k(s-s) - \frac{1}{4k^2} \cos 2ks - \right. \\ & \quad \left. - \frac{1}{2k} s \cdot \sin 2ks + \frac{1}{4k^2} \cos 2ks - \frac{1}{4k^2} \right) ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \int_0^t \left(\frac{1}{4k^2} - \frac{1}{4k^2} \cos 2ks + \frac{s^2}{2} - \frac{1}{2k} s \cdot \sin 2ks \right) ds = \\ & = \frac{1}{4k^2} \left(\frac{1}{4k^2} t - \frac{1}{8k^3} \sin 2kt + \frac{t^3}{6} + \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{4k^2} t \cdot \cos 2kt - \frac{1}{8k^3} \sin 2kt \right) = \\ & = \frac{1}{24k^2} t^3 + \frac{1}{16k^4} t(1 + \cos 2kt) - \frac{1}{16k^5} \sin 2kt \\ & \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{E\varepsilon_1(t)}{t^3} = \frac{1}{24k^2} \end{aligned}$$

Теорему доведено.

4. Висновок

У цій роботі знайдена асимптотична поведінка математичного сподівання повної енергії гармонічного осцилятора без тертя під впливом енергетичного насосу з керуючим елементом вигляду стохастичного гармонічного осцилятора без тертя зі збуренням типу «білого шуму» у резонансному $E\varepsilon(t) \sim \frac{1}{24k^2} t^3$ і нерезонансному

$$E\varepsilon(t) \sim \frac{3k_2^2+k_1^2}{4k_2^2(k_1^2-k_2^2)^2} t \text{ випадках при } t \rightarrow +\infty.$$

References

1. BANDERSKYI, M. and PASTUR, L. (1975) Ob asymptotike uravneni 2-go poriyadka so sluchaynym koefitsientom *Teoriya funktsiyi, funktsion. analiz i ikh pril.*, 22, p.3-14.
2. GIKHMAN, I. and SKOROKHOD, A. *Vvedenie v teoriyu sluchaynykh protsessov.* Moskva: Nauka.
3. DIVNICH, M., KIROVSKYI, D. and YERSHOV, A. (2005) Asymptotichnyi analiz matematichnogo spodivannya povnoyi energiyi vipadkovogo garmonichnogo oscilyatora *Visn. Kyiv. Un-ty. Matematika, mekhanika.*, 3, p.104-

- Математика, механіка. – 2005. – №3 . – С. 104-112.
4. Кулинич Г. Л., Бернацкая Ю. В. О фазовом «портрете» гармонического осциллятора с трением, возмущенного случайным процессом типа «белого шума» // *Мат. зап.* – 1998. – 68, №4. – С. 862-869.
 5. Кулініч Г. Л. Якісний аналіз впливу на гармонічний осцилятор з тертям випадкових збурень типу «білого шуму» вздовж вектора фазової швидкості // *Укр. мат. Журн.* – 1997. – 49, №1. – С. 36-47.
 6. Кулініч Г. Л. Якісний аналіз поведінки гармонічного осцилятора під впливом випадкових збурень параметрів процесами типу «білого і дробового шумів» // *Теорія ймовірностей і мат. статистика.* – 1998. – Вип. 58. – С. 81-91.
 7. Кулініч Г. Л., Куровський Д. Ю., Петрусенко Д. В. Про асимптотичну поведінку гармонічного осцилятора математичного сподівання повної енергії стохастичного гармонічного осцилятора // *Мат. XI Між нар. Наук. Конф. Ім. акад. М. Кравчука.* – Київ, 2006. – С. 719.
 8. Кулініч Г.Л. Про граничну поведінку випадкового осцилятора // *Вісн. Київ. ун-ту. Математика, механіка.* – 1985. – Вип.. 25. – С. 108-113.
 9. Леваков А.А. Введение в теорию интегралов Лебега и Ито. Пособие для студентов прикладной математики и информатики [Электронный ресурс]. – 2010. – Режим доступа до ресурсу: <http://elib.bsu.by/bitstream/123456789/1631/1/metmain.pdf>. – С. 18-22.
 10. Эльсгольц Л.Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. – М.:Наука.1965. – 424с.
 11. Kulinich G. L. On the limiting behaviors of a harmonic oscillator with random external disturbance // *Y.A.M.S.A.* – 1995. – 8. – p. 265-274.
 12. Kulinich G. L. Qualitative analysis of the influence of random perturbations of the phase velocity of the harmonic oscillator // *Random Oper. And Stochast. Equat.* – 1995. – 3, №2. – p. 141-152.
 13. Papanirolan G.G. Stochastic equations and their applications // *Amer. Math. Mon.* – 1973. – 80, №5. – p. 526-545.
 - 112.
 4. KULINICH, G. and BERNATSKAYA, YU. (1998) O fazovom “portrete” garmonicheskogo oscillatora s treniem, vozmushennogo sluchaynyim protsessom tipa “belogo shuma” *Math. Zap.*, 68 (4), p. 862-869.
 5. KULINICH, G. (1997) Yakisnyi analiz vplivu na garmonichniy oscillator z tertiyam vipadkovikh zburen’ tipu “bilogo shumu” vzdovzh vektora fazovoyi shvidkosti *Ukr. Math. Journ.*, 49 (1), p.36-47.
 6. KULINICH, G. (1998) Yakisnyi analiz povedinki garmonichnogo oscillyatora pid vplivom vipadkovikh zburen’ parametriv protsessami tipu “bilogo I drobovogo shumiv” *Teoriya imovirnostey i math. statistika*, 58, p. 81-91.
 7. KULINICH, G., KUROVSKYI, D. and PETRUSENKO, D. (2006) Pro asymptotichnu povedinku garmonichnogo ostsillatora matematichnogo spodivannya povnoyi energiyi stokhastichnogo garmonichnogo ostsillatora *Math. XI Mizhnar. Nauk. Conf. Im. Akad. M. Kravtchuka.* Kyiv, p.719.
 8. KULINICH, G. (1985) Pro granichnu povedinku vipadkovogo oscillatora *Visn. Kyiv. Un-ty. Matematika, mekhanika.*, 25, p.108-113.
 9. LEVAKOV, A. (2010) Vvedenie v teoriyu integralov Lebeга I Ito. Posobie dlya studentov prikladnoy matematiki i informatiki [Online] p.18-22. – Avialable from: <http://elib.bsu.by/bitstream/123456789/1631/1/metmain.pdf>.
 10. EL’TSGOL’TS, L. (1965) *Differentsial’nie uravneniya i variatsionnoe ischisleniye.* Moskva: Nauka.
 11. KULINICH, G. (1995) On the limiting behaviors of a harmonic oscillator with random external disturbance *Y.A.M.S.A.*, 8, p.265-274.
 12. KULINICH, G. (1995) Qualitative analysis of the influence of random perturbations of the phase velocity of the harmonic oscillator *Random Oper. And Stochast. Equat.*, 3 (2), p.141-152.
 13. PAPANIROLAN, G. (1973) Stochastic equations and their applications *Amer. Math. Mon.*, 5, p.526-545.

УДК 519.9

Петрова Т.О.¹, к.ф.-м.н., доц.

**Один контрприклад для опуклого
наближення функцій, що мають дробову
похідну, при $r > 4$**

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4е,
e-mail: tamarapetrova2703@gmail.com

Petrova T. O.¹, PhD in Ph.-mat.s., As. Prof

**One counterexample for convex
approximation of function with fractional
derivatives, $r > 4$**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e
e-mail: tamarapetrova2703@gmail.com

Досліджується питання наближення функцій $f \in W^r [0,1] \cap \Delta^2, r > 4$ алгебраїчними поліномами $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^2$. Побудовано контрприклад, який узагальнює негативний результат роботи [9], в якій доведено, що для $f \in W^r [0,1] \cap \Delta^2, r > 4$ оцінка $|f(x) - p_n(x)| \leq c \frac{1}{n^2} (\sqrt{x(1-x)})^r, x \in [0,1]$ є невірною. Також результат роботи поширює негативний результат наведений в роботі [10].

Ключові слова: наближення функції, простір Соболева, алгебраїчний поліном, монотонна функція, опукла функція.

We discuss whether or not it is possible to have interpolatory estimates in the approximation of a function $f \in W^r [0,1]$ by polynomials. The problem of positive approximation is to estimate the pointwise degree of approximation of a function $f \in C^r [0,1] \cap \Delta^0$ where Δ^0 is the set of positive functions on $[0,1]$. Estimates of the form (1) for positive approximation are known ([1],[2]). The problem of monotone approximation is that of estimating the degree of approximation of a monotone nondecreasing function by monotone nondecreasing polynomials. Estimates of the form (1) for monotone approximation were proved in [3],[4],[8]. In [3],[4] is consider $r \in \mathbb{N}, r > 2$. In [8] is consider $r \in \mathbb{R}, r > 2$. It was proved that for monotone approximation estimates of the form (1) are fails for $r > 2, r \in \mathbb{R}$. The problem of convex approximation is that of estimating the degree of approximation of a convex function by convex polynomials. The problem of convex approximation is that of estimating the degree of approximation of a convex function by convex polynomials. The problem of convex approximation is consider in ([5],[6],[11]). In [5] is consider $r \in \mathbb{N}, r > 2$. It was proved that for convex approximation estimates of the form (1) are fails for $r \in \mathbb{N}, r > 2$. In [6] is consider $r \in \mathbb{R}, r \in (2;3)$. It was proved that for convex approximation estimates of the form (1) are fails for $r \in \mathbb{R}, r \in (2;3)$. In [11] is consider $r \in \mathbb{R}, r \in (3;4)$. It was proved that for convex approximation estimates of the form (1) are fails for $r \in \mathbb{R}, r \in (3;4)$. In [9] is consider $r \in \mathbb{R}, r > 4$. It was proved that for $f \in W^r [0,1] \cap \Delta^2, r > 4$ estimate (1) is not true. In this paper the question of approximation of function $f \in W^r [0,1] \cap \Delta^2, r > 4$ by algebraic polynomial $p_n \in \Pi_n \cap \Delta^2$ is consider. It is proved, that for $f \in W^r [0,1] \cap \Delta^2, r > 4$, estimate (1) can be improved, generally speaking.

Key Words: approximation of function, Sobolev space, algebraic polynomial, monotone function, convex function.

Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор, академік НАН України Перестюк М.О.

Вступ

Нехай $W^r [0,1], r \in \mathbb{N}$ клас функцій $f \in C[0,1]$, таких, що мають абсолютно неперервну $(r-1)$ похідну і $|f^{(r)}(x)| \leq 1$ майже скрізь на $[0,1]$. Теляковський [1] для $r=1$ та Гопенгауз для $r \in \mathbb{N}$ [2] посилили пряму теорему Нікольського – Тімана довівши, що кожену функцію $f \in W^r [0,1]$ можна наблизити алгебраїчним многочленом p_n степеня $< n$ так, що

$$|f(x) - p_n(x)| \leq c(r) \left(\frac{\sqrt{x(1-x)}}{n} \right)^r, n > r \quad (1)$$

де c - абсолютна стала.

DeVore та Yu [3] довели, що при $r=1,2$ оцінка (1) справедлива і при наближенні монотонної функції монотонним многочленом. А саме, якщо монотонна функція $f \in W^r [0,1]$, то існує монотонний многочлен p_n , такий, що має місце (1). В роботі GLSW [4] доведено, що для натурального $r > 2$ оцінка (1), взагалі кажучи, невірна.

Для опуклого наближення при $r > 2, r \in \mathbb{N}$ доведено [5], що оцінка (1) також є невірною.

Для $r \in \mathbb{R}$ введемо клас функцій $W^r [0,1]$, таких, що $D_{0+}^{r-1} f$ абсолютно неперервна і $|D_{0+}^r f| \leq 1$ майже скрізь на $[0,1]$ (тут $D_{0+}^{r-1} f$ - лівостороння дробова похідна [1]). Будемо позначати через Π_n - множину всіх алгебраїчних поліномів степеня $\leq n$ і через Δ^2 множину опуклих вниз функцій на $[0,1]$.

В роботах [5],[6],[11] було доведено, що оцінка (1) є невірною для $r \in (2;3), r \in (3;4)$ і $r > 4$ відповідно, $r \in \mathbb{R}$.

Основним результатом роботи є теорема, яка узагальнює результати робіт [9] та [10].

Основний результат.

Теорема. Нехай $r > 4, r \in \mathbb{R}$. Тоді $\forall n \in \mathbb{N}$
 $\exists F = F_{r,n} \in W^r [0,1] \cap \Delta^2$ така, що $\forall p_n \in \Pi_n \cap \Delta^2$

$$\text{або } \limsup_{x \rightarrow 0} \frac{|F(x) - p_n(x)|}{\varphi^r(x)\psi(x)} = +\infty \quad (2)$$

$$\text{або } \limsup_{x \rightarrow 1} \frac{|F(x) - p_n(x)|}{\varphi^r(x)\psi(x)} = +\infty, \quad (3)$$

де $\varphi(x) = \sqrt{x(1-x)}$ і $\psi(x)$ додатна функція на $(0;1)$ така, що $\lim_{x \rightarrow 0} \psi(x) = 0, \lim_{x \rightarrow 1} \psi(x) = 0$.

Доведення.

Позначимо $m = [r] + 1, r > 4$, де $[r]$ - ціла частина r .

Покладемо:

$$f(x) = \begin{cases} \frac{b^{m-1}}{(m-1)!} x + \frac{(b-x)^m}{m!} - \frac{b^m}{m!}, 0 \leq x \leq b \\ \frac{b^{m-1}}{(m-1)!} x - \frac{b^m}{m!}, b < x \leq 1 \end{cases}$$

, де $b = \frac{1}{4}$.

Розглянемо функцію $F(x) = x^{m-2} f(x)$.

Доведемо, що $F \in W^r [0,1]$. За *Теоремою 2.3* [7] маємо

$$D_{0+}^r F(x) = \sum_{k=0}^{m-1} \frac{F^{(k)}(0)}{\Gamma(1+k-r)} x^{k-r} + \frac{1}{\Gamma(m-r)} \int_0^x \frac{F^{(m)}(t)}{(x-t)^{r-m+1}} dt$$

Так як $F^{(k)}(0) = 0 \forall k = 0, \dots, m-1$, то

$$D_{0+}^r F(x) = \frac{1}{\Gamma(m-r)} \int_0^x \frac{\sum_{k=0}^{m-2} C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1) t^{m-2-k} f^{(m-k)}(t)}{(x-t)^{r-m+1}} dt$$

Таким чином, якщо $x \neq b$, то

$$D_{0+}^r F(x) = \frac{1}{\Gamma(m-r)} \int_0^x \sum_{k=0}^{m-2} \frac{C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1) t^{m-2-k} (-1)^{m-k} (b-t)^k}{k! (x-t)^{r-m+1}} dt =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1) \int_0^x \frac{(-1)^{m-k} t^{m-2-k} (b-t)^k}{k! (x-t)^{r-m+1}} dt$$

Тоді

$$|D_{0+}^r F(x)| \leq \frac{1}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1)}{k!} \cdot \int_0^x \frac{dt}{(x-t)^{r-m+1}} =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1)}{k!} \frac{x^{m-r}}{m-r} \leq$$

$$\frac{x^{m-r}}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{C_m^k (m-2)(m-3)\dots(m-k-1)}{k!} =$$

$$= \frac{x^{m-r}}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{m!(m-2)!}{(k!)^2 ((m-k+2)!)^2} \leq$$

$$\leq \frac{1}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{m!(m-2)!}{(k!)^2 ((m-k+2)!)^2}$$

Помітимо, що $D_{0+}^r (b+) = 0$ і

$$D_{0+}^r (b-) \leq \frac{b^{m-r}}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{m!(m-2)!}{(k!)^2 ((m-k+2)!)^2} \leq$$

$$\leq \frac{1}{\Gamma(m-r)} \sum_{k=0}^{m-2} \frac{m!(m-2)!}{(k!)^2 ((m-k+2)!)^2}$$

Таким чином $D_{0+}^r F(x)$ існує майже скрізь на $[0,1]$ і обмежена. Очевидно, що

$$D_{0+}^{r-1} F(x) = \frac{1}{\Gamma(m-r)} \int_0^x \frac{F^{(m-1)}(t)}{(x-t)^{r-m+1}} dt \text{ є абсолютно}$$

неперервною на $[0,1]$. Таким чином, $F \in W^r[0,1]$.

Так як $F''(x) \geq 0 \forall x \in [0,1]$, то $F \in W^r[0,1] \cap \Delta^2$.

Нехай існує многочлен $h_n(x)$, степеня $\leq n$ який є опуклим вниз і для якого не виконується умова (2) з функцією $F(x)$. Тоді з деякою сталою A

$$\text{маємо: } |F(x) - h_n(x)| \leq Ax^2 \psi(x), 0 \leq x \leq b \text{ і}$$

$$h_n(0) = F(0) = 0, h'_n(0) = F'(0) = 0, h''_n(0) = F''(0) = 0.$$

Так як $h''_n(x) \geq 0, \forall x \in [0,1]$, то $h'_n(x)$ зростає і так як $h'_n(0) = 0$, то $\forall x \in [0,1]: h'_n(x) \geq 0$. Тоді

многочлен $h_n(x)$ зростає на $[0,1]$ і $\forall x \in [0,1]: h_n(x) \geq 0$.

Розглянемо многочлен

$$\tilde{h}_n(x) = h_n(x) - \frac{b^{m-2}}{2!(m-2)!} x^2, x \in [0,1]$$

$$\tilde{h}''_n(x) = h''_n(x) - \frac{b^{m-2}}{(m-2)!}$$

$$\tilde{h}''_n(0) = h''_n(0) - \frac{b^{m-2}}{(m-2)!} = -\frac{b^{m-2}}{(m-2)!}$$

За нерівністю Маркова маємо:

$$|\tilde{h}''_n(0)| = \frac{b^{m-2}}{(m-2)!} \leq$$

$$\leq 4n^2(n-1)^2 \|\tilde{h}_n\| \leq 4n^2(n-1)^2 \|h_n\| = 4n^2(n-1)^2 h_n(1) \quad (1)$$

звідки $h_n(1) \geq \frac{b^{m-2}}{(m-2)! 4n^2(n-1)^2}$. Маємо

$$f(1) = \frac{b^{m-1}}{(m-1)!} - \frac{b^m}{m!} = \frac{b^{m-1}}{(m-1)!} \left(1 - \frac{b}{m}\right) =$$

$$\frac{b^{m-2}}{(m-2)! 4n^2(n-1)^2} \frac{b \cdot 4n^2(n-1)^2}{m-1} \left(1 - \frac{b}{m}\right) <$$

$$< \frac{b^{m-2}}{(m-2)! 4n^2(n-1)^2} \frac{4}{m-1} \leq \frac{b^{m-2}}{(m-2)! 4n^2(n-1)^2}$$

Таким чином, $f(1) \neq h_n(1)$. Так як $F(1) = f(1)$, то $F(1) \neq h_n(1)$. Теорема доведена.

Висновки.

В роботі було побудовано контрприклад для класу функцій $f \in W^2[0,1] \cap \Delta^2, r > 4, r \in \mathbb{R}$, який узагальнює негативні результати отримані в роботах [9], [10].

Список використаних джерел

1. Теляковский С.А. Две теоремы о приближении функций алгебраическими полиномами / С.А. Теляковский - *Мат. сб.* - 1966 - **13**, №79 – с.252-265
2. Gopengauz A.I., Pointwise estimates of Hermitian interpolation / A.I. Gopengauz - *Constr. Approx.* – 1994-9, №77 – p.34-43
3. DeVore R.A., Pointwise estimates for monotone polynomial approximation / DeVore R.A. and Yu X.M // *Constr. Approx.*–1985, №1–p.323–331.
4. Gonska H.H. Interpolatory pointwise estimates for polynomial approximations / H. H. Gonska, D. Leviatan, I. A. Shevchuk, and H. -J. Wenz // *Constr. Approx.* -2000-26, №16 – p.603–629.
5. Петрова Т.О., Контрприклад у інтерполяційному опуклому наближенні / Т. О. Петрова - праці Інституту математики НАН України «Математика та її застосування Теорія наближення функцій» -2005, №35 - с.107-112
6. Петрова Т.О., Один контрприклад для наближення функцій, що мають дробову похідну / Т. О. Петрова - *Вісник Київського університету. Фізико - математичні науки* - 2006 -5, №4 – с.113–118
7. Samko S. G., Fractional integrals and derivatives: theory and applications / S. G. Samko Kilbas A. A., and Marichev O.I. // *Constr.Approx* – 1987, №4 – p. 119-126
8. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки монотонного наближення функцій, що мають дробову похідну / Т. О. Петрова - *Вісник Київського університету. Математика –Механіка*-2003-2, №9-10 125–127.
9. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну довільного порядку / Т. О. Петрова, І. Л. Петрова - *Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки* -2017-16-с.145-151
10. K. A. Kopotun, D. Leviatan, I. A. Shevchuk, Interpolatory estimates for convex piecewise polynomial approximation // *Journal of Mathematical Analysis and Applications* –2019– №474–P.467–479
11. Петрова Т.О., Про поточкові інтерполяційні оцінки опуклого наближення функцій, що мають дробову похідну довільного порядку $r \in (3,4)$ / Т. О. Петрова *Вісник Київського університету. Математика–Механіка*-2017, №2(38)– с.9-11

References

1. TELYAKOVSKIY S.A. (1966) Dve teoremy o priblizhenii funkciy algebraicheskimi polinomami, *Mat. sb.* 79, p.252-265
2. GOPENGAUZ A.I. (1994) Pointwise estimates of Hermitian interpolation 77, p.34-43
3. DeVore R.A. and YU X.M. (1985) Pointwise estimates for monotone polynomial approximation, *Constr. Approx.*, 1 p.323–331.
4. H. H. GONSKA, D. LEVIATAN, I. A. SHEVCUK, and H. -J. WENZ (2000) Interpolatory pointwise estimates for polynomial approximations, *Constr. Approx.* 16, p.603–629.
5. PETROVA T.O., (2005) Kontrpriklad u interpolyatsiinomu opuklomu nablyzhenni, *Pratsi Instytutu matematyky NAN Ukrainy "Matematyka ta zastosuvannya. Teoriya nablyzhennia functsii"*, 35 p.107–112.
6. PETROVA T.O. (2006) Kontrpriklad u interpolyacijnomu opuklomu nablizhenni, *praci Instytutu matematiki NAN Ukrayini "Matematika ta yiyi zastosuvannya. Teoriya nablizhennya funkciy* 4, p.113–118
7. SAMKO S. G., KILBAS A. A., and MARICHEV O.I. (1987) Fractional integrals and derivatives: theory and applications, *Constr.Approx* 4, p.119-126
8. PETROVA T.O. (2003) Pro potochkovi interpolyacijni ocinki monotonogo nablizhennya funkciy, sho mayut drobovu pohidnu, *Visnik Kiyivskogo universitetu. Matematika–Mehanika* 9-10, p.125–127
9. Petrova T.O., Pro potochkovi interpolyacijni ocinky` opuklogo nably`zhennya funkciy, shho mayut` drobovu poxidnu dovil`nogo poryadku / T. O. Petrova, I. L. Petrova - *Matematy`chne ta komp'yuterne modelyuvannya. Seriya: Fyzy`ko-matematy`chni nauky`* -2017-16-p.145-151
10. K. A. Kopotun, D. Leviatan, I. A. Shevchuk, Interpolatory estimates for convex piecewise polynomial approximation // *Journal of Mathematical Analysis and Applications* –2019– №474–P.467–479
11. Petrova T.O., Pro potochkovi interpolyacijni ocinky` opuklogo nably`zhennya funkciy, shho mayut` drobovu poxidnu dovil`nogo poryadku $r \in (3,4)$ / Т. О. Petrova *Visny`k Ky`yivs`kogo universy`tetu. Matematy`ka–Mehanika*-2017, #2(38)– p.9-11

Надійшла до редколегії 04.12.18

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 519.6

Бевза М. В.¹, асп.,

M. V. Bevza¹, PhD stud.,

**Об'єднання вбудовувань для покращення
регуляризації нейронних мереж для задачі
розпізнавання іменованих сутностей**

**Tying of embeddings for improving
regularization in neural networks for named
entity recognition task**

¹ Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹ maksym.univ@gmail.com,

¹ Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹ maksym.univ@gmail.com,

У цій роботі ми аналізуємо архітектури нейронних мереж, що отримують найкращі результати у розв'язку задачі розпізнавання іменованих сутностей, та пропонуємо нову архітектуру для покращення цих результатів. Ми проаналізували літературу по новим підходам до створення нейронних мереж і, базуючись на цьому, запропонували підхід для покращення архітектури існуючих нейронних мереж для задачі розпізнавання іменованих сутностей. Ми приводимо обґрунтування чому запропоновані методи покращують узагальненість мережі і як результат - якість її роботи.

Ключові слова: нейронні мережі, розпізнавання іменованих сутностей, регуляризація, узагальненість, мульти-задачне тренування

We analyze neural network architectures that yield state of the art results on named entity recognition task and propose a new architecture for improving results even further. We have analyzed a number of ideas and approaches that researchers have used to achieve state of the art results in a variety of NLP tasks. In this work, we present a few of them which we consider to be most likely to improve existing state of the art solutions for named entity recognition task. The architecture is inspired by recent developments in language modeling task. The suggested solution is based on a multi-task learning approach. We incorporate part of speech tags as input for the network. Part of speech tags to be yielded by some state of the art tagger and also ask the network to produce those tags in addition to the main named entity recognition tags. This way knowledge distillation from a strong part of speech tagger to our smaller network is happening. We hypothesize that designing neural network architecture in this way improves the generalizability of the system and provide arguments to support this statement.

Keywords: neural networks, named entity recognition, regularization, generalizability, multi-task learning

Статтю представив д.ф.-м.н., проф., Анісімов А. В.

Вступ

Стрімкий ріст кількості інформації у всесвітній мережі “Інтернет” призводить до необхідності розробки автоматичних методів роботи з нею. Більшість інформації в публічному доступі є неструктурованою і потребує інтелектуальних систем, які матимуть змогу обробляти її і отримувати корисні структуровані дані для подальшої обробки.

Однією з таких інтелектуальних систем є NER-система (Named Entity Recognition). Вона розв’язує задачу визначення іменованих сутностей. В літературі найчастіше розглядають наступні чотири їх типи: LOC, PER, ORG, MISC - місцевість, персона, організація, інше.

У цій роботі ми аналізуємо існуючі на даний момент роботи, що розв’язують задачу NER, архітектури їх нейронних мереж, а також пропонуємо альтернативну нейронну мережу, яка використовує теги частин мови (POS-tags) як додатковий вхід для покращення узагальненості мережі, а як результат - підвищення точності на тестовому наборі даних.

Сучасні методи розв’язку задачі розпізнавання іменованих сутностей використовують рекурентні (RNN) та згорткові (CNN) нейронні мережі, а також умовні випадкові поля (Conditional Random Fields).

Рекурентна нейронна мережа (RNN) може отримувати на вхід наперед невизначену кількість вхідних даних в послідовності і опрацьовувати їх послідовно. Щоправда, є практичні обмеження щодо кількості вхідних даних у одній послідовності, які зумовлені обмеженим розміром прихованого шару мережі. Рекурентні нейронні мережі мають велику популярність в сучасних методах обробки текстів, за рахунок їх можливості “пам’ятати” контекст речення, при подачі їм на вхід послідовності слів. Найбільш поширені реалізації рекурентних нейронних мереж - це LSTM [2] та GRU.

Згорткова нейронна мережа, вперше описана в роботі LeCun & Bengio [3], отримує на вхід послідовність фіксованого розміру і

працює в вузькому контексті (декілька елементів послідовності на вхід і один вихід). Згорткові нейронні мережі набули більшого поширення для задач обробки зображень, тому що інформація про конкретний піксель важлива не сама по собі, а в контексті сусідніх пікселів. Згодом згорткові нейронні мережі були використані і для задач, які пов’язані з текстом і послідовностями змінної довжини.

Умовні випадкові поля використовуються для розв’язку задач, що вимагають певної структури у вихідних даних. Для розв’язку задачі NER часто використовують BIO нотацію, що вимагає певну структуру у вихідних даних. У розділі “Система міток” буде детальніше описано необхідність використання умовних випадкових полів.

Наша робота має наступну структуру. У розділі “Система міток” ми опишемо систему класів, розпізнавання яких ми поставимо як задачу нашій нейронній мережі. У розділі “Огляд літератури” ми коротко узагальнимо існуючі підходи, що отримують найкращу якість визначення іменованих сутностей. У розділі “Архітектура нейронної мережі” ми опишемо нашу пропозицію щодо використання тегів частини мови для задачі NER, а також обґрунтуємо чому ми вважаємо, що цей підхід дасть покращення якості роботи мережі.

2. Система міток

2.1 BIO-нотація

Задача розпізнавання іменованих сутностей - це задача маркування послідовності, тобто класифікації кожного її елемента на один з N класів. Для того, щоб мати можливість розмітити якусь сутність, яка складається з декількох слів часто використовують BIO нотацію. BIO - це Beginning (початок), Inside (внутрішність), Outside (зовнішність).

Правила маркування наступні:

- кожне слово, яке є початком сутності помічається “B-<TYPE>”, де <TYPE> - це тип сутності (LOC, PER, ORG, MISC).
- решта слів помічають “I-<TYPE>”

Для прикладу речення “Barak Obama is a president of United States” буде розмічено наступним чином: “Barak[B-PER] Obama[I-PER] is[O] a[O] president[O] of[O] United[B-LOC] States[I-LOC]”. Таким чином наявні дві сутності: персона Barak Obama і місцевість United States.

В нашому випадку задача кожне слово послідовності буде прокласифіковане на одне з наступних класів:

1. O
2. B-PER
3. I-PER
4. B-LOC
5. I-LOC
6. B-ORG
7. I-ORG
8. B-MISC
9. I-MISC

2.2 Умовні випадкові поля

Умовні випадкові поля (CRF) [8] використовуються для розрахунку ймовірності всієї послідовності $P(y_1, \dots, y_n)$. Найчастіше їх використовують для структурного передбачення, тобто коли на вихід системи накладаються якісь обмеження. У нашому випадку обмеження є тільки одне. Мітка I-<TYPE> може слідувати тільки за міткою B-<TYPE> того ж типу <TYPE>.

Опис принципу роботи CRF виходить за межі цієї роботи і ми пропонуємо читачу звернутися до роботи Lafferty et al. [8] за детальним описом цього методу.

- кожне слово, яке не є частиною жодної сутності помічається “O”

3. Огляд літератури

Найкращі результати у розв’язанні задачі NER отримують системи побудовані на основі нейронних мереж. У цьому розділі ми проаналізуємо існуючі архітектури і підходи до розв’язку цих задач.

У роботі Ма & Нову [1] автори пропонують використати двосторонню рекурентну мережу, що отримує на вхід вбудовування слів, які вони самі і навчають в процесі тренування. Нагадаємо, що двостороння рекурентна мережа відрізняється від звичайної односторонньої тим, що це - дві рекурентні мережі, одна з яких отримує послідовність на вхід в прямому порядку, а інша - в зворотному, а отримані виходи з цих мереж об’єднуються конкатенацією їх векторів, створюючи вектор вдвічі більшої розмірності.

Вбудовування слів отримують за допомогою матриці emb розміром $D \times E$, де D - розмір словника слів, а E - розмір вбудовувань. $e = emb(w_i)$, $i = 1..n$, де n - довжина вхідної послідовності слів речення $W = (w_1 w_2 .. w_n)$.

Двостороння рекурентна мережа $rnn = [rnn_{fw}, rnn_{bw}]$ отримує на вхід послідовність і результатом її роботи є послідовність довжини n векторів прихованих станів.

$$\begin{aligned} h_{fw} &= rnn_{fw}(x_1, \dots, x_n), & h_{fw} &= (h_{fw,1}, \dots, h_{fw,n}) \\ h_{bw} &= rnn_{bw}(x_n, \dots, x_1), & h_{bw} &= (h_{fw,n}, \dots, h_{fw,1}) \\ h &= [h_{fw}, h_{bw}] \end{aligned}$$

Робота Ма & Нову [1] використовує LSTM як базову рекурентну одиницю. Їхня мережа навчається вбудовувань слів emb самостійно, а також додатково вбудовування

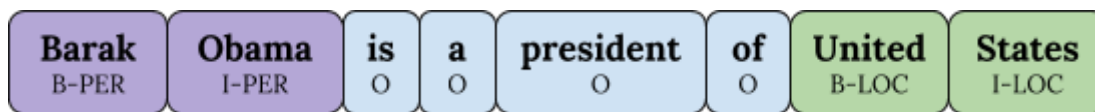


Рис. 1. Приклад маркування BIO-нотацією

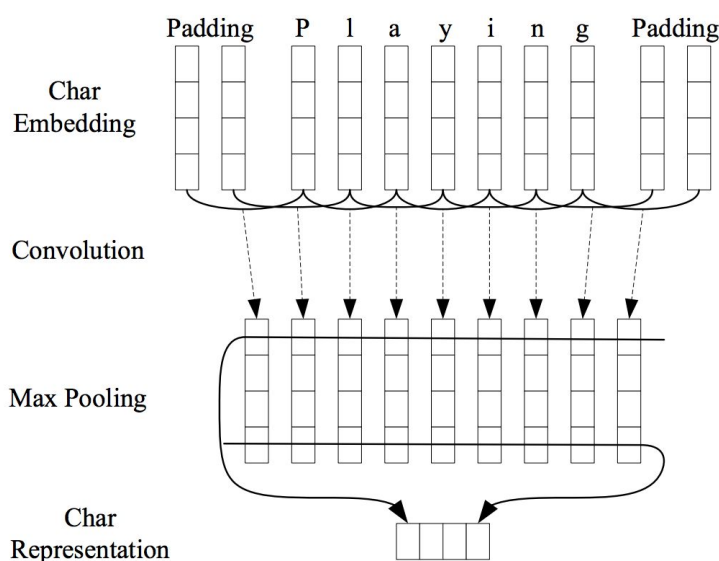


Рис. 2. Застосування згорткової мережі для побудови символних репрезентацій слова. Джерело: Ma & Novy [1]

отримуються на основі символних репрезентацій. Для отримання символної репрезентації згорткова мережа опрацьовує кожне слово на рівні символів і буде багатовимірний вектор який об'єднується зі стандартним вбудовуванням на рівні слів. Для отримання коректної послідовності результуючих міток, в роботі використано CRF [8] (див. секцію “Система міток”).

У роботі Lample et al. [5] архітектура мережі ідентична до тієї, що запропонована Ma & Novy [1] за виключенням способу отримання вбудовувань слів. Вони пропонують робити це наступним способом: обробити послідовність символів за допомогою двосторонньої LSTM мережі.

Ця мережа отримує на вхід послідов-

ність вбудовувань символів і вихід з останнього прихованого шару слугує вбудовуванням на основі символів. Ця мережа також використовує CRF для забезпечення коректної послідовності результуючих міток.

4. Архітектура нейронної мережі

У цій роботі ми пропонуємо архітектуру нейронної мережі, що складається з шару вбудовувань, двох шарів рекурентної нейронної мережі (LSTM), а також двох повнозв'язних шарів. Перший повнозв'язний шар буде видавати розподіл ймовірностей по словнику NER міток (O, B-LOC, I-LOC, B-PER, I-PER, B-ORG, I-ORG, B-MISC, I-MISC), а другий повнозв'язний шар буде видавати розподіл ймовірностей по словнику POS-міток.

У архітектурі, що ми пропонуємо, кожне слово буде супроводжено також тегом частини мови. Ми побудуємо два словники: словник слів V_w , та словник тегів частин мови V_{pos} . Матриця вбудовувань для V_w позначимо E_w , для V_{pos} - E_{pos} .

$$e_i = E_w(w_i)$$

$$e_{pos,i} = E_{pos}(pos_i)$$

Далі ми використаємо дві двосторонні рекурентні мережі. Одна буде отримувати на вхід послідовність вбудовувань слів, а друга - вбудовувань частин мови.

$$h_w = rnn_w(e_1, e_2, \dots, e_n)$$

$$h_{pos} = rnn_{pos}(e_{pos,1}, e_{pos,2}, \dots, e_{pos,n})$$

Отримані приховані стани використаємо для передбачення міток NER та тегів частин мови. Для цього використаємо повнозв'язні шари нейронної мережі, що перетворюють приховані стан в розподіл ймовірностей по словнику міток. out_{ner} та out_{pos} для міток NER та POS відповідно.

$$p_{ner} = softmax(out_{ner}(h_w))$$

$$p_w = softmax(out_{pos}([h_{pos}, h_w]))$$

$$softmax(x) = \frac{exp(x_i)}{\sum_{i=1}^k exp(x_i)}$$

Звернемо увагу, що для отримання розподілу ймовірностей рпег інформація про справжні мітки, що були подані на вхід, не використовується, в іншому випадку мережа навчалася б просто запам'ятовувати теги частин мови, а не передбачати їх, що призвело б до поганого рівня узагальнення навчання мережі, а отже - поганої якості роботи.

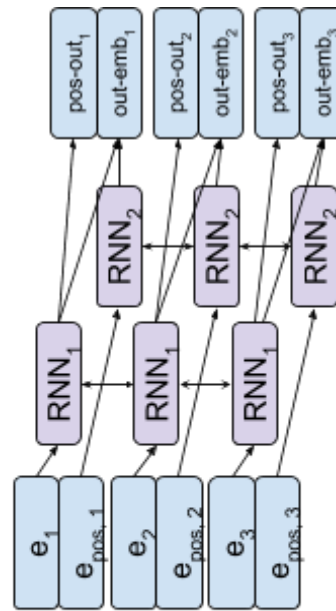


Рис. 3. Схематичне зображення запропонованої архітектури нейронної мережі

Звернемо увагу, що матриця E_{pos} та матриця out_{pos} мають однакові розмірності з точністю до операції транспонування:

$$E_{pos} = out_{pos}^T.$$

Ми пропонуємо ототожнити ці матриці і навчати їх одночасно. Ми вважаємо, що аналогічно до роботи Melis et. al. [6] ми отримаємо кращі результати, за рахунок того, що мережа буде мати меншу кількість степеней свободи і це буде запобігати перенавчанню на тренувальній вибірці.

Список використаних джерел

1. Ма К., Хові І., Розмічення послідовностей за допомогою двосторонньої LSTM-CNN-CRF мережі. // *Proceedings of the 54th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers)*. 2016. – 1064-1074 с.
2. Хошрейтер С., Шмідхубер Ю., Довга корострокова пам'ять // *Neural Computation*. 9 – 1997. – 1735-1780 с.
3. Леқун Й., Бенжіо Й., Згорткові мережі для обробки зображень та звуку. // *The handbook of brain theory and neural networks*. – 1995. – 255-258 с.
4. Валлаш Х. Умовні випадкові поля: вступ. // *Foundations and Trends in Machine Learning archive*. Volume 4 Issue 4. – 2004. 267-273 с.
5. Лампл Г., Баллестерос М., Субраманіан С., Кавакамі К., Даєр К. Нейронні архітектури для розпізнавання іменованих сутностей. // *Proceedings of the 2016 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies*. – 2016. – 260-270 с.
6. Меліс Г., Даєр К., Блунсом П. Про найкращі результати в оцінках нейронних мереж. // *International Conference on Learning Representations*. – 2007 – 214-216 с.
8. Ляфферті Й., Мак-Каллум А., Перейра Ф. Умовні випадкові поля: моделі для сегментування і розмітки послідовностей. // *Proc. 18th International Conf. on Machine Learning*. Morgan Kaufmann. – 2001 – 282-289 с.

References

1. MA, X. & HOVY, E. (2016) End-to-end sequence labeling via bi-directional LSTM-CNNs-CRF. In *Proceedings of the 54th Annual Meeting of the Association for Computational Linguistics (Volume 1: Long Papers)*. pp. 1064-1074.
2. HOCHREITER, S. & SCHMIDHUBER, J. (1997). Long short-term memory. *Neural Computation*. 9: pp. 1735–1780.
3. LECUNN, Y., BENGIO, Y. (1995). Convolutional Networks for Image, Speech, and Time-Series. In *The handbook of brain theory and neural networks*. pp. 255-258.
4. WALLACH, H. (2004). Conditional Random Fields: An Introduction. In *Foundations and Trends in Machine Learning archive*. Volume 4 Issue 4, pp. 267-273
5. LAMPLE, G. & BALLESTEROS, M. & SUBRAMANIAN, S. & KAWAKAMI, K. & DYER, C. (2016). Neural Architectures for Named Entity Recognition. In *Proceedings of the 2016 Conference of the North American Chapter of the Association for Computational Linguistics: Human Language Technologies*. pp. 260–270.
6. MELIS, G. & DYER, C. & BLUNSOM, P. (2017). On the state of the art of evaluation in neural language models. In *International Conference on Learning Representations*. pp. 214-216.
8. LAFFERTY, J., MCCALLUM, A., PEREIRA, F. (2001). Conditional random fields: Probabilistic models for segmenting and labeling sequence data. *Proc. 18th International Conf. on Machine Learning*. Morgan Kaufmann. pp. 282–289.

Надійшла до редколегії 29.01.2019

УДК 519.21.

Нікітін А. В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Балясникова О. А.². викладач

Оптимізація функціоналів в умовах невизначеності для стохастичних диференціальних рівнянь Іто-Скорохода у гільбертових просторах

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: nikitin2505@gmail.com,

²Державний вищий навчальний заклад «Чернівецький індустріальний коледж», 58001, м. Чернівці, вул. Садова, 8,
e-mail: 1_oksana.balyasnikova@gmail.com

A.V. Nikitin¹, PhD.,
O. A. Baliasnikova. lecturer

Optimization of functionals under uncertainties for Ito-Skorokhod stochastic differential equations in Hilbert spaces

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: nikitin2505@gmail.com,

²State Higher Educational Institution “Chernivtsi Industrial College”, 58001, Chernivtsi, Sadova st, 8,
e-mail: 1_oksana.balyasnikova@gmail.com

У статті для стохастичних диференціальних рівнянь Іто-Скорохода досліджуються проблеми оптимізації функціоналів в умовах невизначеності у гільбертових просторах. Мета статті – встановити низку тверджень, в яких доведено існування та побудовано вигляд μ оптимальних керувань для таких рівнянь.

Ключові слова: стохастичне диференціальне рівняння, гільбертів простір, оптимізація функціоналів в умовах невизначеності.

In the article for the stochastic differential equations of Ito-Skorokhod, problems of optimization of functionals under conditions of uncertainty in Hilbert spaces are investigated. Purpose of the article is to investigate some properties of stochastic differential equations in Hilbert spaces. These objects arise in diverse areas of applied mathematics as models for various natural phenomena, in particular, the evolution of complex systems with infinitely many degrees of freedom. For instance, one may think of the liquid fuel motion in the tank of a spacecraft. Spacecraft constructors should take into account this motion, for it influences heavily the path of a spacecraft. Also, optimization of the motion is an issue of principal importance. It is not trivial to carry over the results concerning stochastic differential equations in finite-dimensional spaces to the infinite dimensional case. We give some statements, in which the existence, uniqueness is proved and the explicit form μ -optimal controls for such equations is constructed, in particular, μ -optimal control is found as a linear inverse relationship.

Keywords: stochastic differential equation, space of guillotine, optimization of functionals under uncertainty.

Статтю представив проф. Пашко А.О.

Вступ

Метою роботи є дослідження деяких властивостей стохастичних диференціальних рівнянь в гільбертових просторах. Ці об'єкти виникають у різних областях прикладної математики як моделі для різних явищ природи, зокрема, еволюція складних систем з нескінченною кількістю ступенів свободи [3]. Наприклад, рух рідкого палива в резервуарі космічного апарату [4]. Конструктори космічних

апаратів повинні враховувати цей рух, оскільки він сильно впливає на шлях космічного апарату. Оптимізація руху має принципове значення. Перенесення результатів, які стосуються стохастичних диференціальних рівнянь у скінченновимірних просторах на нескінченновимірним випадок є зовсім не тривіальним.

Постановка задачі

Розглянемо у сепарабельному гільбертовому просторі X рівняння

$$\begin{aligned} dx(t) &= a(t, x(t), u(t), \theta)dt + \\ &+ \sum_{k=1}^{\infty} b_k(t, x(t), u(t), \theta)dW_k(t), \quad (1) \\ x(0) &= x_0, \quad 0 < t < T, \end{aligned}$$

де x_0 – випадковий вектор, що не залежить від скалярних вінерових процесів $W_k(t)$, $u(t)$ – функція з гільбертового простору H , норма якої інтегрована на $(0, T)$, θ – вектор параметрів, що належить Θ простору \square^n . Будемо вважати, що функції $a_1(t, x, \theta) = a(t, x, u(t), \theta)$, $b_{1k}(t, x, \theta) = b_k(t, x, u(t), \theta)$ при кожному параметрові θ , і функції $u(t) \in U \subseteq L_2(H)$ – задовольняють умовам існування та дності розв’язків рівняння (1), де $L_2(H)$ – простір функцій з H , норми яких інтегровані з квадратом на $(0, T)$.

Нехай також на розв’язках рівняння (1) заданий функціонал

$$I(u, \theta) = \int_0^T E f(x(t), u(t), t) dt + E \Phi(x(T)), \quad (2)$$

де відповідні середні значення існують і функції $E f(x(t), u(t), t)$ є інтегрованими за Лебегом на $(0, T)$.

Проблема, яку ми дослідили, полягала в тому, щоб знайти функцію $\hat{u}(t)$, яку називатимемо керуванням, що не залежить від параметра θ і для якої в певному сенсі функціонал $I(u, \theta)$ має мінімальне значення.

Покладемо, що в Θ – виділена σ -алгебра підмножин B і на B задана імовірнісна міра $\mu(\cdot)$.

Означення 1. Нехай міра $\mu(\cdot)$ така, що виконується умова

$$I(u) = \int_{\Theta} I(u, \theta) \mu(d\theta) < \infty.$$

Назвемо функцію $\hat{u}(t) \in \text{Argmin } I(u)$ μ -оптимальним керуванням рівняння (1) з функціоналом (2).

Зауважимо, що якщо Θ – скінченна множина, тобто $\Theta = \{\theta_1, \dots, \theta_N\}$, то міра $\mu(\cdot)$

зосереджена в точках θ_k , $k=1, \dots, N$, причому, якщо позначити $\mu(\theta_k) = p_k$, то

$$I(u) = \sum_{k=1}^N p_k I(u, \theta_k),$$

і тоді μ -оптимальне керування є векторним мінімумом за Парето в багатокритеріальній задачі. Далі ми будемо вважати, що $f(x, u(t), t) \geq 0$, $\Phi(x) \geq 0$.

Введемо скалярну функцію $V(t, x)$, $x \in X$, що задовольняє рівнянню

$$\begin{aligned} \Phi(x) - V(t, x) &+ \int_t^T (a(\tau, x, u(\tau), \theta), V'(\tau, x)) d\tau + \\ &+ \frac{1}{2} \int_t^T \sum_{k=1}^{\infty} (V''(\tau, x) b_k(\tau, x, u(\tau), \theta), b_k(\tau, x, u(\tau), \theta)) d\tau + \\ &+ \int_t^T f(x, u(\tau), \tau) d\tau = 0, \quad (3) \end{aligned}$$

де $V'(\tau, x)$, $V''(\tau, x)$ – перша та друга похідні Фреше по змінній x .

Зауважимо, що якщо така функція існує, то вона є неперервною по t , і майже скрізь виконується рівність

$$\begin{aligned} \frac{\partial V}{\partial t} &+ (a(t, x, u(t), \theta), V'(t, x)) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} V''(t, x) b_k(t, x, u(t), \theta), b_k(t, x, u(t), \theta) + \\ &+ f(x, u(t), t) = 0, \quad (4) \end{aligned}$$

$$V(T, x) = \Phi(x).$$

Результати

Лема 1. Припустимо, що існує функція $V(t, x)$, що є розв’язком рівняння (3) та існує константа $c(\theta) > 0$ така, що

$$\begin{aligned} |V(t, x)| &\leq c(\theta)(1 + |x|^2), \\ |V'(t, x)| &\leq c(\theta)(1 + |x|), \end{aligned}$$

$$\|V''(t, x)\| \leq c(\theta).$$

Тоді має місце рівність

$$I(u) = \int_{\Theta} E V(0, x_0) \mu(d\theta). \quad (5)$$

Доведення слідує з того, що якщо ввести випадковий процес $y(s, t, x)$, що є розв’язком рівняння

$$dy(s, t, x) = a(s, y, u(s), \theta)ds + \\ + \sum_{k=1}^{\infty} b_k(t, y, u(s), \theta)dW_k(s) \\ y(s, t, x) = x, \text{ при } s \geq t,$$

і застосувати формулу Іто диференціювання до процесу $\xi(s) = V(s, y(s, t, x))$, то на підставі існування відповідних середніх, одержимо

$$E \xi(T) - \xi(t) = - \int_t^T E f(y(s, t, x), u(s), s) ds,$$

а оскільки $\xi(t) = V(t, x)$, $E \xi(T) = E \Phi(y(T, x, t))$, то одержуємо, що

$$V(t, x) = E \left(\int_t^T f(x(s), u(s), s) ds + \Phi(x(T)) \right) |_{x(t)=x},$$

а значить,

$$EV(0, x_0) = I(u, \theta),$$

тобто,

$$I(u) = \int_{\Theta} EV(0, x_0) \mu(d\theta),$$

що і потрібно було довести.

Лема 2. Нехай функції $f_1(t, u, \theta) = E f(t, u, \theta)$ та $f_2(u, t) = E \Phi(x(T))$ – слабонапівнеперервні знизу по змінній $u \in L_2(H)$ при кожному дійсному $\theta \in \Theta$ і виконується одна з двох умов

1) Множина U є обмеженою і слабо замкненою;

$$2) \lim_{u \rightarrow \infty} I(u) = \infty.$$

Тоді існує μ -оптимальне керування.

Доведення цього твердження впливає із загальних теорем існування точки мінімуму в гільбертових просторах.

Припустимо далі, що мають місце рівності

$$a(t, x, u(t), \theta) = A(t, u(t), \theta)x, \\ b_k(t, x, u(t), \theta) = b_k(t, u(t), \theta),$$

де $A(t, u(t), \theta)$ – обмежені лінійні оператори в просторі X .

Лема 3. Позначимо через $\Phi(t, s)$ операторну функцію, яка є розв'язком рівняння

$$\frac{d\Phi(t, s)}{dt} = A(t, u(t), \theta)\Phi(t, s), \quad (6)$$

$$\Phi(s, s) = E,$$

і припустимо, що збігається ряд

$$\sum_{k=1}^{\infty} |b_k(c, u(t), \theta)|^2,$$

функції $A(t, u(t), \theta)$, $b_k(t, u(t), \theta)$ неперервні по змінним $t \in [0, T]$ та $u \in U$. Тоді розв'язок рівняння

$$dx(t) = A(t, x(t), u(t), \theta)dt + \\ + \sum_{k=1}^{\infty} b_k(t, u(t), \theta)dW_k(t), \quad (7) \\ x(0) = x_0,$$

має вигляд

$$x(t) = \Phi(t, 0)x_0 + \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^t \Phi(t, s)b_k(s, u(s), \theta)dW_k(s). \quad (8)$$

Доведення цього твердження впливає із означення розв'язку рівняння (7) і перевірки того, що функція (8) задовольняє інтегральному рівнянню

$$x(t) = x_0 + \int_0^t A(s, x(s), u(s), \theta)ds + \\ + \int_0^t b_k(s, u(s), \theta)dW_k(s)$$

Будемо далі розглядати той випадок, коли функції $f(x, u, t)$ та $\Phi(x)$ мають вигляд $f(x, u, t) = (Q_1 x, x)$, $\Phi(x) = (Q_0 x, x)$, де Q_0, Q_1 – невід'ємнозначні обмежені оператори.

Позначимо через $P(t)$ узагальнений розв'язок операторного рівняння

$$-\frac{dP}{dt} = A^*(t, u(t), \theta)P + PA(t, u(t), \theta) + Q_1, \quad (9)$$

$$P(T) = Q_0.$$

Теорема 1. Функція $I(u, \theta)$ має вигляд

$$I(u, \theta) = E(P(0)x_0, x_0) + c(0),$$

де

$$c(0) = \int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (P(t)b_k(t, u(t), \theta), b_k(t, u(t), \theta))dt$$

Доведення. Будемо шукати розв'язок рівняння (4) у вигляді

$$V(t, x) = (P(t)x, x) + c(t),$$

оскільки

$$\frac{\partial V}{\partial t} = (P'(t)x, x) + c'(t),$$

де

$$c'(t) = \sum_{k=1}^{\infty} (P(t)b_k(t, u(t), \theta), b_k(t, u(t), \theta)),$$

а

$$V'(t, x) = 2P(t)x, \quad V''(t, x) = 2P(t),$$

то враховуючи рівняння для $P(t)$, одержимо, що функція $V(t, x)$ є розв'язком рівняння (4), звідки і одержимо потрібну рівність.

Зауваження 1. Рівняння (9) має єдиний розв'язок, який може бути поданий у вигляді

$$P(t) = \Phi(t, T)Q_0\Phi^*(t, T) + \int_t^T \Phi(t, \tau)Q_1\Phi^*(t, \tau)d\tau,$$

де операторна функція є розв'язком рівняння

$$\frac{d\Phi(t, s)}{dt} = -A^*(t, u(t), \theta)\Phi(t, s),$$

$$\Phi(s, s) = E.$$

Розглянемо далі той випадок, коли $x(t)$ є розв'язком рівняння

$$dx = A(t, \theta)x(t)dt + B(t)u(t)dt + \sum_{k=1}^{\infty} D_k(t)u(t)dW_k(t), \quad (10)$$

$$x(0) = x_0,$$

де $A(t, \theta)$, $B(t)$, $D_k(t)$ – обмежені лінійні оператори, норми яких є неперервними на $[0, T]$. Введемо функціонал

$$I(u, \theta) = E(Q_0 x(T), x(T)) + E \int_0^T (Q_1 x(t), x(t))dt + \int_0^T (Q_2 u(t), u(t))dt,$$

де Q_0 , Q_1 , Q_2 – невід'ємно визначені лінійні оператори.

Теорема 2. Нехай існує константа $\gamma^2(\theta) > 0$ така, що $\int_{\Theta} \gamma^2(\theta)\mu(d\theta) < \infty$ і виконується нерівність

$$\int_0^T ((Q_2 + \sum_{k=1}^{\infty} D_k^* P(t) D_k) u(t), u(t))dt \geq \gamma^2(\theta) \int_0^T |u(t)|^2 dt$$

для всіх $u(\cdot) \in L_2(H)$.

Множина допустимих керувань співпадає з простором $L_2(H)$. Тоді існує єдине μ -оптимальне керування, яке має вигляд

$$\hat{u}(t) = - \int_{\Theta} \tilde{Q}_2^{-1}(t) B^*(t) \psi(t, \theta) \mu(d\theta), \quad (11)$$

$$\tilde{Q}_2(t) = Q_2 + \sum_{k=1}^{\infty} D_k^* P(t) D_k,$$

де функція $\psi(t, \theta)$ знаходиться з розв'язку системи рівнянь

$$\begin{cases} \frac{d\psi}{dt} = A^*(t, \theta)\psi + Q_1 x_1(t), & \psi(T) = Q_0 x_1(T), \\ \frac{dx_1}{dt} = A(t, \theta)x_1 + B(t)\hat{u}(t), & x_1(0) = m_0, \quad m_0 = E x_0 \end{cases}$$

Доведення. Можна показати, що функціонал $I(u, \theta)$ має вигляд

$$I(u, \theta) = I_1(u, \theta) + E(P(0)(x_0 - m_0), x_0 - m_0),$$

де

$$I_1(u, \theta) = (Q_0 x_1(T), x_1(T)) + \int_0^T (Q_1 x_1(t), x_1(t))dt + \int_0^T (\tilde{Q}_2 u(t), u(t))dt,$$

а функція $x_1(t)$ є розв'язком рівняння

$$\frac{dx_1}{dt} = A(t, \theta)x_1 + B(t)u(t), \quad x_1(0) = m_0.$$

Оскільки функціонал $I_1(u, \theta)$ – слабонапівнеперервний знизу по змінній $u(\cdot)$ в просторі $L_2(H)$ і для нього виконана оцінка

$$I_1(u, \theta) \geq \gamma^2(\theta) \int_0^T |u|^2 dt,$$

то функціонал

$$I(u) = \int_{\Theta} I_1(u, \theta) \mu(d\theta) + E \int_{\Theta} (P(0)(x_0 - m_0), x_0 - m_0) \mu(d\theta)$$

також буде слабонапівнеперервним знизу і

$$\lim_{|u| \rightarrow \infty} I(u) = \infty.$$

Крім того, $I(u)$ є сильно опуклим, а значить, існує єдина функція $\tilde{u}(\cdot) \in \text{Arg min } I(u)$.

З умови

$$\frac{dI}{d\tau}(\hat{u} + \tau v)|_{\tau=0} = \int_{\Theta} \frac{d}{d\tau} I(\hat{u} + \tau v, \theta) \mu(d\theta) \equiv 0$$

для довільної функції $v \in L_2(H)$, одержимо потрібний вираз для функції $\tilde{u}(t)$.

Нехай далі $Q_1(t) = 0$.

Теорема 3. Функція $\hat{u}(t)$ є єдиним розв'язком інтегрального рівняння

$$\tilde{\Phi}_2(s)u(s) + \int_0^T B^*(\tau)\tilde{\Phi}(s,\tau)B(\tau)u(\tau)d\tau = g(s),$$

де

$$\tilde{\Phi}(s,\tau) = \int_{\Theta} \Phi^*(\tau,s)Q_0\Phi(\tau,s)\mu(d\theta),$$

$$I g(s) = -\int_{\Theta} B^*(s)\tilde{\Phi}(s,0)m_0\mu(d\theta),$$

а функція $\Phi(\tau,s)$ є розв'язком рівняння

$$\frac{d\Phi(s,\tau)}{ds} = A(s,\theta)\Phi(s,\tau), \quad \Phi(\tau,\tau) = E.$$

Доведення. Подамо $x_1(t)$ у вигляді

$$x_1(t) = \int_0^t \Phi(t,s)B(s)u(s)ds + \Phi(t,0)m_0,$$

тобто функціонал $I_1(u, \theta)$ набуде такого вигляду

$$\begin{aligned} I_1(u, \theta) &= (Q_0 \int_0^T \Phi(T,s)B(s)u(s)ds, \int_0^T \Phi(T,s)B(s)u(s)ds) + \\ &+ \int_0^T (\tilde{Q}_2(t)u(t), u(t))ds \\ &+ 2(Q_0 \Phi(T,0)m_0, \int_0^T \Phi(T,s)B(s)u(s)ds) = \\ &= \int_0^T \int_0^T (\Phi^*(T,\tau)Q_0\Phi(T,s)B(s)u(s), B(\tau)u(\tau))dsd\tau + \\ &+ 2\int_0^T (\Phi^*(T,s)Q_0\Phi(T,0)m_0, B(s)u(s))ds = \\ &= \int_0^T \int_0^T (\tilde{\Phi}_1(\tau,s)u(s), u(\tau))dsd\tau + 2\int_0^T (b(s), u(s))ds, \end{aligned}$$

де

$$\tilde{\Phi}_1(\tau,s) = B^*\Phi^*(T,\tau)Q_0\Phi(T,s)B(s),$$

$$b(s) = B^*(s)\Phi^*(T,s)Q_0\Phi(T,0).$$

З умови

$$\frac{d}{dt} I(u + \delta v)|_{\tau=0} = 0, \quad \forall v \in L_2(H),$$

одержимо потрібне інтегральне рівняння.

За уваження 2. Аналогічне інтегральне рівняння можливо одержати і у випадку $Q_1 \neq 0$.

Далі розглянемо випадок, коли функція $x(t)$ є розв'язком рівняння

$$\begin{aligned} dx(t) &= A(t)x(t)dt + B(t)u(t)dt + \sum_{k=1}^{\infty} b_k(t,\theta)dW_k(t) \\ x(0) &= x_0, \end{aligned}$$

де $A(t)$, $B(t)$ – лінійні обмежені оператори, норми яких неперервні на $[0, T]$, x_0 – випадковий вектор, який не залежить від $W_k(t)$, $E x_0 = m_0$, кореляційний оператор якого є R_0 .

Нехай функціонал

$$I_1(u, \theta) = E(Q_0 x(T), x(T)) + E \int_0^T (Q_2(x(t), u(t))dt),$$

де Q_0 , Q_2 – невід'ємно визначені лінійні обмежені оператори, причому існує константа $c > 0$ така, що $(Q_2, u, u) \geq c |u|^2$.

Будемо шукати μ -оптимальне керування у вигляді лінійного оберненого зв'язку, тобто у вигляді $u(t) = K(t)x(t)$, де $K(t)$ – лінійний обмежений оператор, що діє із простору H у простір X і норма якого неперервна на $[0, T]$. μ -оптимальне керування визначимо з умови

$$\hat{K} \in \text{Arg min } I_1(K),$$

де

$$\begin{aligned} I_1(K) &= \int_{\Theta} I_1(K, \theta) \mu(d\theta), \\ I_1(K, \theta) &= E(Q_0 x(T), x(T)) + \\ &+ E \int_0^T (Q_2 K(t)x(t), K(t)x(t))dt, \end{aligned}$$

і функція $x(t)$ є розв'язком рівняння

$$\begin{aligned} dx(t) &= A_1(t)x(t)dt + \sum_{k=1}^{\infty} b_k(t,\theta)dW_k(t), \\ x(0) &= x_0, \end{aligned}$$

$$A_1(t) = A(t) + B(t)K(t).$$

Теорема 4. Нехай $S(t)$ є розв'язком рівняння

$$-\frac{dS(t)}{dt} = A^*(t)S(t) + S(t)A(t) - S(t)BQ_2^{-1}B^*S(t),$$

$$S(T) = Q_0$$

і виконується умова

$$\int_0^T \int_{\Theta} \sum_{k=1}^{\infty} (S(t)b_k(t, \theta), b_k(t, \theta)) dt \mu(d\theta) < \infty.$$

Тоді

$$\hat{K} = -Q_2^{-1}B^*(t)S(t)$$

і при цьому

$$I_1(\hat{K}) = E(S(0)x_0, x_0) +$$

$$+ \int_0^T \int_{\Theta} \sum_{k=1}^{\infty} (S(t)b_k(t, \theta), b_k(t, \theta)) dt \mu(d\theta).$$

Доведення . функціонал $I_1(K, \theta)$ подамо у вигляді

$$I_1(K, \theta) = E(S(0)x_0, x_0) +$$

$$+ E \int_0^T (Q_2^{-1}((Q_2 K + B^*S)x(t), (Q_2 K + B^*S)x(t))) dt +$$

$$+ \int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (S(t)b_k(t, \theta), b_k(t, \theta)) dt,$$

і, оскільки

Список використаних джерел

1. Скороход А. Асимптотические методы теории стохастических дифференциальных уравнений. – Київ: Наукова думка, 1987. – 328 с.
2. Наконечний О.Г. Гарантовані оцінки розв'язків лінійних рівнянь в гільбертовому просторі з випадковими параметрами / О.Г. Наконечний, М.М. Верес, Б.В. Стащук // Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2011. -- №1(104), - С.85-96.
3. Da Prato G. and Zabczyk J. Stochastic equations in infinite dimensions, Cambridge University Press, 2014. 512 p.
4. Korachevsky, N. D. Complete second order linear differential equations in a Hilbert space and hydrodynamics applications. Intern. Conf. Differential Equations and Related Topics, dedicated to the Centenary Anniversary of I.G. Petrovsky, Russia, Moscow, May 22-27, 2001, Book of Abstracts. pp. 207-208.

$$I_1(K) \geq E(S(0)x_0, x_0) +$$

$$+ \int_0^T \int_{\Theta} \sum_{k=1}^{\infty} (S(t)b_k(t, \theta), b_k(t, \theta)) dt \mu(d\theta),$$

то нижня границя досягається при

$$\hat{K} = Q_2^{-1}B^*(t)S(t),$$

що і потрібно було показати.

Висновки

Для систем, що перебувають в умовах невизначеності та описуються стохастичними диференціальними рівняннями Іто-Скорохода у гільбертових просторах, можна поставити та розв'язати задачу оптимального керування, зокрема, з допомогою методу оптимізації функціоналів

References

1. SKOROKHOD A. (1987) Asymptotic methods of the theory of stochastic differential equations. – Kyiv: Naukova dumka.
2. NAKONECHNYI O., VERES M., STASHCHUK M. (2011) Guaranteed estimates of solutions of linear equations in a Hilbert space with random parameters // Journal of Computational and Applied Mathematics.
3. DA PRATO G., ZABCZYK J. (2014) Stochastic equations in infinite dimensions, Cambridge University Press.
4. KORACHEVSKY, N. (2001) Complete second order linear differential equations in a Hilbert space and hydrodynamics applications. Intern. Conf. Differential Equations and Related Topics, dedicated to the Centenary Anniversary of I.G. Petrovsky, Russia, Moscow, May 22-27, 2001, Book of Abstracts.

УДК 519.233.2+681.5

Олександр С. Слабоспицький,
к.ф.-м.н., доц.

Рекурентний алгоритм для оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів з найменшими відхиленнями від точок “тяжіння” для білінійних дискретних динамічних систем

Київський національний університет
імені Тараса Шевченка, пр. Глушкова, 4д,
м. Київ, 03680, Україна,
e-mail: sl@univ.kiev.ua

Alexander S. Slabospitsky,
Ph.D. (Physics & Mathematics), Associate Prof.

Recurrent algorithm for non-stationary parameter estimation by least squares method with least deviations from ‘attraction’ points for bilinear discrete dynamic systems

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
4d Glushkov av., Kyiv, 03680, Ukraine,

e-mail: sl@univ.kiev.ua

Розглядається задача оцінювання нестационарних параметрів для білінійної дискретної динамічної системи у випадку, коли для матриць невідомих параметрів їх точки “тяжіння” задані в кожен момент. Отримані явна та рекурентна форми представлення для оцінок матриць параметрів методом найменших квадратів зі змінним фактором забування та найменшою нормою відхилення від точок “тяжіння” при неklasичних припущеннях.

Ключові слова: рекурентне оцінювання нестационарних параметрів, оператор псевдообернення, білінійна система, метод найменших квадратів зі змінним фактором забування, точки “тяжіння”.

The estimation problem of slowly time-varying parameter matrices is considered for bilinear discrete dynamic system in the presence of disturbances. The least squares estimate with variable forgetting factor is investigated for this object in non-classical situation when this estimate may be not unique and additionally ‘attraction’ points for unknown parameter matrices are given at any moment. The set of all above-mentioned estimates of these unknown matrices is defined through the Moore-Penrose pseudo-inverse operator. The least squares estimate with variable forgetting factor and least deviation norm from given ‘attraction’ point at any moment is proposed as unique estimate on this set of all estimates. The explicit form of representation is obtained for this unique estimate of the parameter matrices by the least squares method with variable forgetting factor and least deviation norm from given ‘attraction’ points under non-classical assumptions. The recurrent algorithm for this estimate is also derived which does not require the usage of the matrix pseudo-inverse operator.

Keywords: recurrent non-stationary parameter estimation, pseudo-inverse operator, bilinear system, least squares method with variable forgetting factor, ‘attraction’ points.

Статтю представив д. т. н., проф. Гаращенко Ф.Г.

1. Вступ. Побудова якісних математичних моделей для високотехнологічних об’єктів неможлива без ефективного розв’язання задачі знаходження оптимальних оцінок їх невідомих параметрів. В залежності від об’єму доступної апріорної інформації про невизначеності системи можна використовувати різні методи параметричного оцінювання [1, 2]. Досить широко при розв’язанні такого роду задач використовується метод найменших квадратів (МНК) [3].

При справедливості класичних припущень оцінка МНК буде єдиною, але якщо вони порушуються, то виникає потреба у використанні

оператора псевдообернення за Муром-Пенроузом [4, 5]. Саме у останньому випадку оцінка МНК з найменшою нормою для стаціонарних параметрів регресійної моделі була досліджена у роботі [6]. Там же були отримані рекурентні алгоритми для цієї оцінки та відповідної залишкової суми квадратів. На випадок оцінювання нестационарних параметрів регресійної моделі за допомогою МНК зі змінним фактором забування останні результати було перенесено у роботах [7, 8].

Припустимо, що класичні припущення, які гарантують єдиність оцінки МНК можуть не

мати місце, але нехай у кожен момент часу задані точки “тяжіння” для невідомих параметрів об’єкту, який досліджується. Тоді логічно в якості єдиної оцінки взяти оцінку МНК з найменшою нормою відхилення від цих заданих точок “тяжіння” для параметрів системи у кожен момент часу. Саме для такої оцінки стаціонарних параметрів регресійної моделі та відповідної залишкової суми квадратів рекурентні співвідношення були отримані у роботі [9]. Потім ці результати були узагальнені на випадок оцінювання нестационарних невідомих

параметрів регресійної моделі [10, 11]. Згодом відповідні рекурентні алгоритми були отримані для оцінок матриць невідомих параметрів дискретних лінійних динамічних систем у публікації [12].

У даній роботі останні результати по оцінюванню нестационарних параметрів за допомогою МНК зі змінним фактором забування та найменшою нормою відхилення від заданих точок “тяжіння” у кожен момент часу поширюються на клас білінійних дискретних динамічних систем в умовах невизначеності.

2. Оцінка нестационарних параметрів білінійної динамічної системи. Розглянемо задачу оцінювання матриць невідомих параметрів $A, B_1, B_2, \dots, B_m, B$ дискретної системи

$$x(k+1) = Ax(k) + \sum_{i=1}^m u_i(k)B_i x(k) + Bu(k) + \xi(k), \quad k \in \mathbb{N}, \quad (1)$$

де $x(k)$ - доступний для спостереження n - вимірний вектор фазового стану, $\xi(k)$ - вектор похибок моделі, $u(k) = (u_1(k), u_2(k), \dots, u_m(k))^T$ - відомий вектор керувань, \mathbb{N} - множина натуральних чисел.

Припустимо, що матриця параметрів $\mathcal{A} = (A | B_1 | B_2 | \dots | B_m | B)$ може повільно змінюватися з плином часом і для неї у кожен момент часу N доступна інформація про її точку “тяжіння” $\mathcal{A}_*(N) = (A_*(N) | B_{1*}(N) | B_{2*}(N) | \dots | B_{m*}(N) | B_*(N))$, $N = 0, 1, 2, \dots$.

Множина усіх оцінок матриці параметрів \mathcal{A} у момент часу N методом найменших квадратів зі змінним фактором забування $\lambda(k)$ ($\lambda(k) \in (0, 1]$, $k \in \mathbb{N}$), якщо можуть порушуватися класичні припущення, які гарантують її єдиність, визначається як

$$\text{Arg min}_{\mathcal{A}} Q(\mathcal{A}, N), \quad (2)$$

де $Q(\mathcal{A}, N) = \sum_{k=1}^N w(k, N) \|\xi(k)\|^2$, $\|\cdot\|$ - евклідова норма, $w(k, N) = \begin{cases} \prod_{i=k}^{N-1} \lambda(i), & \text{якщо } k = \overline{1, N-1}, \\ 1, & \text{якщо } k = N. \end{cases}$

Теорема 1. Оцінка $\hat{\mathcal{A}}(N) = (\hat{A}(N) | \hat{B}_1(N) | \hat{B}_2(N) | \dots | \hat{B}_m(N) | \hat{B}(N))$ методу найменших квадратів зі змінним фактором забування та з найменшою нормою відхилення від заданої точки “тяжіння” $\mathcal{A}_*(N)$ у кожен момент часу N для білінійної дискретної динамічної системи (1) має вигляд:

$$\hat{\mathcal{A}}(N) = [\tilde{Z}_N^+ \tilde{X}_{2, N+1}^T]^T + \mathcal{A}_*(N) [E_{n+nm+m} - \tilde{Z}_N^+ \tilde{Z}_N], \quad N \in \mathbb{N}, \quad (3)$$

де $(^+)$ - оператор псевдообернення за Муром-Пенроузом, E_n - одинична матриця порядку n ,

$$\tilde{X}_{2, N+1} = \begin{pmatrix} \sqrt{w(1, N)} x^T(2) \\ \sqrt{w(2, N)} x^T(3) \\ \vdots \\ \sqrt{w(N, N)} x^T(N+1) \end{pmatrix}, \quad \tilde{Z}_N = \begin{pmatrix} \sqrt{w(1, N)} z^T(1) \\ \sqrt{w(2, N)} z^T(2) \\ \vdots \\ \sqrt{w(N, N)} z^T(N) \end{pmatrix}, \quad z(k) = \begin{pmatrix} x(k) \\ u(k) \otimes x(k) \\ u(k) \end{pmatrix},$$

\otimes - операція тензорного добутку.

Доведення. Для цього представимо систему рівнянь (1) у вигляді

$$\tilde{X}_{2, N+1}^T = \mathcal{A} \tilde{Z}_N^T + \tilde{\Xi}_N^T, \quad N \in \mathbb{N},$$

де $\tilde{\Xi}_N^T = (\sqrt{w(1, N)} \xi(1), \sqrt{w(2, N)} \xi(2), \dots, \sqrt{w(N, N)} \xi(N))$.

Так як $\text{Arg min}_{\mathcal{A}} Q(\mathcal{A}, N) = \text{Arg min}_{\tilde{\mathcal{A}}} \|\tilde{\Xi}_N\|^2$, то згідно роботи [12] отримуємо потрібну оцінку (3).

3. Конструювання рекурентного алгоритму оцінювання. Перейдемо до побудови рекурентного представлення для оцінки (3).

Теорема 2. Для оцінки (3) методу найменших квадратів зі змінним фактором забування та з найменшою нормою відхилення від заданої точки “тяжіння” $\mathcal{Q}_*(N)$ у кожен момент часу N для білінійної дискретної динамічної системи (1) справедливо таке рекурентне представлення:

$$\hat{\mathcal{Q}}(N+1) = \hat{\mathcal{Q}}(N) + [\lambda(N+2) - \hat{\mathcal{Q}}(N)z(N+1)]z^T(N+1)R(N+1) + [\mathcal{Q}_*(N+1) - \mathcal{Q}_*(N)]P(N+1), \quad (4)$$

причому якщо $\delta(N+1) > 0$, то

$$\left\{ \begin{aligned} R(N+1) &= \frac{1}{\lambda(N)} \left\{ R(N) - \frac{1}{\delta(N+1)} \left[R(N)z(N+1)z^T(N+1)P(N) + P(N)z(N+1)z^T(N+1)R(N) \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\gamma(N+1)}{\delta^2(N+1)} P(N)z(N+1)z^T(N+1)P(N) \right\}, \\ P(N+1) &= P(N) - \frac{1}{\delta(N+1)} P(N)z(N+1)z^T(N+1)P(N), \end{aligned} \right. \quad (5)$$

а у протилежному випадку

$$\left\{ \begin{aligned} R(N+1) &= \frac{1}{\lambda(N)} \left\{ R(N) - \frac{1}{\gamma(N+1)} R(N)z(N+1)z^T(N+1)R(N) \right\}, \\ P(N+1) &= P(N), \end{aligned} \right. \quad (6)$$

з початковими умовами $\hat{\mathcal{Q}}(0) = \mathcal{Q}_*(0)$, $R(0) = \Theta_{n+nm+m}$, $P(0) = E_{n+nm+m}$,

де $\gamma(N+1) = \lambda(N) + z^T(N+1)R(N)z(N+1)$, $\delta(N+1) = z^T(N+1)P(N)z(N+1)$, Θ_n – нульова квадратна матриця порядку n .

Доведення. Потрібне рекурентне представлення (4)-(6) випливає з вигляду оцінки (3) та застосування до неї результатів з побудови рекурентну з роботи [12].

4. Висновок. В якості оцінки матриці параметрів \mathcal{Q} білінійної дискретної динамічної системи (1) при неklasичних припущеннях запропоновано використовувати оцінку методу найменших квадратів зі змінним фактором

забування та з найменшою нормою відхилення від заданої точки “тяжіння” $\mathcal{Q}_*(N)$ у кожен момент часу N . Для цієї оцінки отримані явна та рекурентна форми представлення, а саме (3) та (4)-(6) відповідно.

Список використаних джерел

1. *Eykhoff P.* System Identification: Parameter and State Estimation / P. Eykhoff. – Chichester, England: Wiley, 1974. – 555 p.
2. *Ljung L.* System Identification: Theory for the User / L. Ljung. – Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1987. – 544 p.
3. *Hsia T.C.* System Identification. Least-Squares Methods / T.C. Hsia. – Toronto: Lexington Books, 1977. – 165 p.
4. *Moore E. H.* On the reciprocal of the general algebraic matrix / E. H. Moore // Bull. American Mathematical Society. – 1920. – V. 26, № 9. – pp. 394–395.
5. *Penrose R.* A generalized inverse for matrices / R. Penrose // Proc. Cambridge Philoc. Soc. – 1955. – V. 51, № 3. – pp. 406–413.

References

1. EYKHOFF, P. (1974) *System Identification: Parameter and State Estimation*. Chichester, England: Wiley.
2. LJUNG, L. (1987) *System Identification: Theory for the User*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall.
3. HSIA, T.C. (1977) *System Identification. Least-Squares Method*. Toronto: Lexington Books.
4. MOORE, E. H. (1920) On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bull. American Mathematical Society*, V. 26, № 9, pp. 394–395.
5. PENROSE, R. (1955) A generalized inverse for matrices. *Proc. Cambridge Philoc. Soc.*, V. 51, № 3, pp. 406–413.

6. Albert A. Regression and the Moore-Penrose Pseudoinverse / A. Albert. – New York: Academic Press, 1972. – 180 p.
7. Слабоспицький О.С. Рекурентний алгоритм оцінювання методом найменших квадратів зі змінним фактором забування при некласичних припущеннях / О.С. Слабоспицький // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 1999. – № 4. – С. 237-240.
8. Слабоспицький О.С. Рекурентне оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів зі змінним фактором забування при некласичних припущеннях / О.С. Слабоспицький // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2000. – № 1. – С. 282-285.
9. Слабоспицький О.С. Використання додаткової інформації в рекурентному оцінюванні параметрів систем з дискретним часом методом найменших квадратів при некласичних припущеннях / О.С. Слабоспицький // Вісник Київського університету. Серія: фіз.-мат. науки. – 2008. – № 4. – С. 179-182.
10. Слабоспицький О.С. Оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів зі змінним фактором забування та мінімальною нормою відхилення від точок “тяжіння” для систем при некласичних припущеннях / О.С. Слабоспицький // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фіз.-мат. науки. – 2012. – № 4. – С. 199-202.
11. Слабоспицький О.С. Рекурентне оцінювання нестационарних параметрів систем при некласичних припущеннях методом найменших квадратів зі змінним фактором забування та найменшою нормою відхилення від точок “тяжіння” / О.С. Слабоспицький // Журнал обчислювальної та прикладної математики. – 2012. – № 2 (108). – С. 59-65.
12. Слабоспицький О.С. Рекурентний алгоритм для оцінювання нестационарних параметрів методом найменших квадратів зі змінним фактором забування та найменшими відхиленнями від точок “тяжіння” для лінійних динамічних систем при некласичних припущеннях / О.С. Слабоспицький // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія: фіз.-мат. науки. – 2016. – № 3. – С. 106-110.
6. ALBERT, A. (1972) *Regression and the Moore-Penrose Pseudoinverse*. New York: Academic Press.
7. SLABOSPITSKY, A.S. (1999) Recursive algorithm of least squares estimation with variable forgetting factor under nonclassical assumptions. *Bulletin of University of Kiev. Series: Physics & Mathematics*, 4, pp. 237-240.
8. SLABOSPITSKY, A.S. (2000) Recursive estimation of nonstationary parameters by the least squares method with variable forgetting factor under nonclassical assumptions. *Bulletin of University of Kiev. Series: Physics & Mathematics*, 1, pp. 282-285.
9. SLABOSPITSKY, A.S. (2008) Usage of supplementary information in the recurrent parameter estimation of the systems with discrete time by the least squares method under non-classical assumptions. *Bulletin of University of Kiev. Series: Physics & Mathematics*, 4, pp. 179-182.
10. SLABOSPITSKY, A.S. (2012) Non-stationary parameter estimation by the least squares method with variable forgetting factor and minimal deviation norm from ‘attraction’ points for systems under non-classical assumptions. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics*, 4, pp. 199-202.
11. SLABOSPITSKY, A.S. (2012) Recurrent non-stationary parameter estimation of systems under non-classical assumptions by the least squares method with variable forgetting factor and least deviation norm from ‘attraction’ points. *Journal of Computational & Applied Mathematics*, 2 (108), pp. 59-65.
12. SLABOSPITSKY, A.S. (2016) Recurrent algorithm for non-stationary parameter estimation by the least squares method with variable forgetting factor and least deviations from ‘attraction’ points for linear dynamic systems under non-classical assumptions. *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics & Mathematics*, 3, pp. 106-110.

Надійшла до редколегії 09.10.2018.

РАДІОФІЗИКА

УДК 539.3

П'ятецька О. В., к. ф.-м. н., с. н. с.

O. V. Pyatetska, Ph. D. (Phys.-Math.),
Sr. Sci. Researcher

Чисельно-аналітичний розв'язок задачі про демпфірування ізотермічних коливаний прямокутної в'язкопружної пластини

Numerical-analytic solution of the problem about the damping isothermal vibrations of viscoelastic rectangular plates

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Акад.
Глушкова 4-е
e-mail: pyatetskaov@gmail.com

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
03680, Kyiv, Acad. Glushkova av., 4-e
e-mail: pyatetskaov@gmail.com

Розглянуто демпфірування коливаний прямокутних пластин за допомогою як в'язкопружних шарів, так і за допомогою п'єзоелектричних включень. Для моделювання в'язкопружних властивостей пасивних і п'єзоактивних матеріалів використовуються лінійні моделі в'язкопружності інтегрального типу, які є найефективнішими для моделювання дисипативних властивостей матеріалів у лінійній області.

Ключові слова: активне демпфірування, актуатори.

The damping of vibrations of rectangular plates by means of both viscoelastic layers and using piezoelectric inclusions is considered. For modeling viscoelastic properties of passive and piezoelectric materials, linear models of integral type viscoelasticity are used, which are most effective for simulating the dissipative properties of materials in the linear region. In the case of taking into account the influence of the piezoelectric inclusions on the rigid characteristics of the passive plate and in other types of boundary conditions (for example, with rigid fixing of the ends), the finite element method was used to solve the problem of damping. The solutions of concrete problems of damping of stationary and non-stationary vibrations of plates using analytical and finite element methods are given. On the basis of the aforementioned approach, algorithms for solving dynamical problems with both fully and partially electrodes are implemented.

Key Words: active damping, actuators.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Жук Я.О.

1. Вступ

Метою даної роботи є моделювання в'язкопружних властивостей пасивних і п'єзоактивних матеріалів з використанням лінійних моделей в'язкопружності інтегрального типу, які є найефективнішими для моделювання дисипативних властивостей матеріалів у лінійній області.

2. Постановка задачі.

Розглянемо ортотропну в'язкопружну пластину, яка знаходиться під дією динамічного поверхневого стаціонарного або нестаціонарного навантаження. Пластина складається з довільного числа пакетів металевих, полімерних або композитних пасивних (без п'єзоефекту) шарів. На верхній і нижній поверхнях пасивної пластини розміщено в'язкопружні п'єзоелектричні ша-

ри довільної в плані конфігурації, одні з яких виконують функції сенсора, а інші – актуатора. Кількість п'єзошарів в плані та їх геометрична конфігурація вибираються з міркувань найефективнішого демпфірування стаціонарних або нестаціонарних коливаний пасивного пакету. Зокрема, при використанні першого підходу, ці шари можуть покривати всю поверхню пасивної пластини, а демпфірування досягається за рахунок вибору тієї або іншої конфігурації електродів та підведення до них різниці потенціалів необхідної фази та амплітуди. При використанні іншого підходу маємо складну конструктивно-неоднорідну як по товщині, так і в плані пластину. Необхідно мати на увазі, що наведені нижче рівняння описують не пластину в цілому, а кожен її пластинчатий елемент скінчених розмірів (включення, пляма) окремо.

Розглянемо найпростіший випадок граничних умов, що відповідають шарнірному закріпленню торців пластини. Вважаємо, що пластинка має симетричну по товщині структуру і навантажена відомим стаціонарним чи нестаціонарним поверхневим навантаженням. Для демпфювання коливань пластини будемо використовувати прямокутні в плані п'єзоелектричні актуатори. Необхідно вибрати найефективніше розміщення актуаторів (електродів) та їх розміри. Для випадку п'єзошарів, які мають однакові електро-механічні властивості та протилежні напрямки поляризації, вирази для жорсткісних характеристик залежать від присутності чи відсутності електродів між пасивним і п'єзоактивними шарами. При цьому рух пластини описується такою крайовою задачею:

$$D_{11} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2(D_{12} + D_{66}) \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + D_{22} \frac{\partial^4 w}{\partial y^4} + \tilde{\rho} \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - \frac{\partial^2 M_0}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 M_0}{\partial y^2} + q(x, y, t) = 0, \quad (1)$$

$$w = 0, \quad D_{11} \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = M_0, \quad (x = 0; \quad x = a);$$

$$w = 0, \quad D_{22} \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = M_0, \quad (y = 0; \quad y = b)$$

при нульових початкових умовах.

3. Алгоритм розв'язання задачі.

Розв'язок даної задачі шукається у вигляді:

$$w = \sum_m \sum_n w_{mn}(t) \sin k_m x \sin p_n y \quad (2)$$

Для прямокутного в плані включення, яке має розміри c, d та координати центра ξ, η , вираз для викликаного актуатором моменту представимо у формі:

$$M_0 = \sum_p \sum_q M_{pq}(t) \sin k_p x \sin p_q y, \quad (3)$$

де

$$M_{pq}(t) = \frac{16 M(t)}{abk_p p_n} \sin k_m \xi \sin p_n \eta \sin \frac{k_m c}{2} \sin \frac{p_n d}{2},$$

а $M(t)$ пропорційне підведеній до актуатора різниці потенціалів. Поверхнєве навантаження представляється в такій же формі:

$$q(x, y, t) = \sum_m \sum_n q_{mn}(t) \sin k_m x \sin p_n y. \quad (4)$$

Підставляючи (2)-(4) у варіаційне рівняння [1], після використання традиційної варіаційної техніки одержимо інтегро-диференціальне рівняння за часом:

$$\frac{d^2 w_{mn}}{dt^2} + \Delta_{mn} * w_{mn} + p_{mn}(t) - M_{mn}(t) = 0 \quad (5)$$

з нульовими початковими умовами.

Тут

$$\Delta_{mn} = (D_{11} k_m^4 + 2(D_{12} + D_{66}) k_m^2 p_n^2 + D_{22} p_n^4) / \tilde{\rho},$$

$$M_{mn} = M_{mn} / \tilde{\rho}, \quad p_{mn} = q_{mn} / \tilde{\rho}.$$

$$p_{mn}(t) = p_{mn} H(t), \quad M_{mn}(t) = m_{mn} H(t), \quad (5')$$

де $H(t)$ – функція Хевісайда.

Застосування методу осереднення приводить до такого розв'язку цього рівняння [1]:

$$w_{mn}(t) = \frac{p_{mn} - m_{mn}}{\Delta_{mn}^2} \exp\left(-\frac{\Delta_{mn} A_{mn}}{2} t\right) \times$$

$$\times \left[\frac{A_{mn} (p_{mn} - m_{mn})}{\Delta_{mn}^2 (2 - B_{mn})} \sin\left(\frac{B_{mn}}{2} - 1\right) \Delta_{mn} t - \right. \quad (6)$$

$$\left. - \frac{(p_{mn} - m_{mn})}{\Delta_{mn}^2} \cos\left(\frac{B_{mn}}{2} - 1\right) \Delta_{mn} t \right].$$

Тут A_{mn}, B_{mn} відповідно синус – і косинус – перетворення Фур'є ядер $\Delta'_{mn}(t)$. Як видно з (6),

при $p_{mn} = m_{mn}$ відповідна мода не збуджується.

Тому якщо розмістити на поверхні пластини s актуаторів, можна компенсувати s мод коливань і суттєво зменшити амплітуду коливань пластини. Для оптимального вибору координат центра актуатора та його розмірів з метою компенсації відповідної моди необхідно розглянути задачу про вимушені коливання пластини, коли

$$p_{mn}(t) = p_{mn} \cos \omega t. \quad (7)$$

Якщо пластинка не контролюється, тобто до актуатора не підводиться різниці потенціалів, то розв'язок крайової задачі (1) має вигляд:

$$w_{mn} = -p_{mn}^0 / \Delta_{mn},$$

де

$$\begin{aligned} \Delta_{mn} = & \Delta'_{mn} + i\Delta''_{mn} - \tilde{\rho}\omega_{mn}^2 = (D'_{11} + iD''_{11})k_m^4 + \\ & 2[(D'_{12} + iD''_{12}) + 2(D'_{66} + iD''_{66})]k_m^2 p_n^2 + \\ & + (D'_{22} + iD''_{22})p_n^4 - \tilde{\rho}\omega_{mn}^2 \end{aligned}$$

Для шарнірного закріплення резонансна частота визначається формулою:

$$\tilde{\rho}\omega_{mn}^2 = \Delta'_{mn}. \quad (8)$$

При цьому

$$w_{mn} = i p_{mn}^0 / \Delta'_{mn}.$$

Якщо $D''_{mn} = D'_{mn} \operatorname{tg} \delta$, то

$$w_{mn} = i p_{mn}^0 / \Delta'_{mn} \operatorname{tg} \delta.$$

Як видно, при $\operatorname{tg} \delta \ll 1$ прогин буде дуже великим, хоч і скінченним. Зі збільшенням тангенса кута втрат прогин буде зменшуватися. Тепер нехай до актуатора підведена різниця потенціалів, яка змінюється за гармонічним законом з частотою поверхневої сили.

Тоді на резонансі маємо:

$$w_{mn} = i [p_{mn}^0 - (k_m^2 + p_n^2) m_{mn}^0] / \Delta'_{mn} \operatorname{tg} \delta. \quad (9)$$

На кожному актуаторі різниця потенціалів постійна. Тому ми можемо вибрати у виразі (9) довільно тільки одне значення різниці потенціалів на кожному актуаторі. Якщо на поверхню пластини нанесено один актуатор, ми можемо компенсувати тільки одну складову поверхневого навантаження у виразах (6), (9). Як правило, найбільш енергоємною є перша мода коливань, що відповідає індексам $m = n = 1$. При необхідності компенсації декількох мод коливань, потрібно збільшити кількість актуаторів. Для компенсації будь-якої з гармонік необхідно різницю потенціалів вибирати з умови рівності нулеві чисельника виразу (9), тобто покласти

$$p_{mn}^0 - (k_m^2 + p_n^2) m_{mn}^0 = 0. \quad (10)$$

Тоді розв'язок матиме вигляд:

$$w = \sum_{r \neq m} \sum_{s \neq n} \frac{p_{rs}^0 - (k_r^2 + p_s^2) m_{rs}^0}{\Delta_{rs}} \sin k_r x \sin p_s y. \quad (11)$$

$$\text{Тут } \Delta_{rs} = \Delta'_{rs} + i\Delta''_{rs} - \tilde{\rho}\omega_{mn}^2. \quad (12)$$

Як видно з (11), (12), прогин різко зменшується із-за відсутності резонансного члена в (11) і швидкої збіжності ряду Фур'є.

Якщо враховується вплив п'єзошарів на жорсткісні характеристики пластини або розглядаються інші типи граничних умов (наприклад, жорстке закріплення торців), то приходимо до складної задачі для структурно-неоднорідної як по товщині, так і в плані пластини. У цьому випадку знайти будь-які точні аналітичні розв'язки досить важко.

Задачу можна суттєво спростити, якщо використати, наприклад, тришарову пластину, яка складатиметься з пасивного середнього шару та двох п'єзоактивних шарів протилежної поляризації, які покривають всю поверхню пластини. При використанні такого підходу компенсація зовнішнього механічного навантаження досягається нанесенням на п'єзошари нескінченно тонких електродів необхідної конфігурації, до яких підводиться різниця потенціалів, яка вибирається з вищевказаних міркувань. Можна також повністю покрити п'єзошари електродами і потім розрізати електроди на плями необхідної конфігурації.

Для розв'язку задачі активного демпфірування стаціонарних і нестаціонарних коливань можна використати чисельні методи, зокрема, метод скінченних елементів.

Розглянемо техніку використання цього методу для випадку демпфірування нестаціонарних коливань, коли поведінка ізотропного матеріалу описується моделлю Фойгта, а поверхневе навантаження змінюється за часом по закону $q = q_0 H(t)$, де $H(t)$ - функція Хевісайда. При цьому всі оператори в (5') мають вигляд:

$$D_{kl} = D_{kl}^0 + D_{kl}^1 \frac{\partial}{\partial t}. \quad (13)$$

Для згаданого вище механічного навантаження різниця потенціалів буде також змінюватись в часі по закону $V(t) = V_0 H(t)$. Тоді

$$M_0 = \frac{1}{2} \gamma_{11} (h_1 + h_2) V_0 H(t). \quad (14)$$

Константи $E_1, E_2, C_1, C_2, \nu_1, \nu_2$ характеризують пружні й дисипативні властивості пасивного матеріалу [1], а

$$\gamma_{11} = \frac{d_{31}}{S_{11}^E (1 - \nu_1)},$$

$$\nu_1 = -\frac{S_{12}^E}{S_{11}^E}, \quad k_p^2 = \frac{2 d_{31}^2}{S_{11}^E (1 - \nu_1) \varepsilon_{33}^T}.$$

Для шарнірного закріплення торців пластини рівняння (5) прийме вигляд:

$$\frac{d^2 w_{mn}}{dt^2} + 2\mu_{mn} \frac{dw_{mn}}{dt} + \omega_{mn}^2 w_{mn} = F_{mn} H(t),$$

де

$$\omega_{mn}^2 = \frac{D_{11}}{\tilde{\rho}} (k_m^2 + p_n^2)^2, \quad \mu_{mn} = \frac{D_{11}}{2D_{11}} \omega_{mn}^2,$$

$$F_{mn} = \frac{16}{ab k_m p_n \tilde{\rho}} [p_0 - M_0 (k_m^2 + p_n^2)].$$

Розв'язок рівняння (15) повинен задовольняти нульовим початковим умовам. Необхідно зауважити, що для моделі Фойгта це рівняння є точним, а при використанні методу осереднення для рівнянь стану інтегрального типу воно дає наближений розв'язок. Для вказаного типу навантаження можна одержати точний розв'язок, який має вигляд

$$w = \frac{16}{ab D_{11}} \sum_{m=1,3,\dots} \sum_{n=1,3,\dots} \frac{p_0 - (k_m^2 + p_n^2) M_0}{k_m p_n (k_m^2 + p_n^2)^4} \times$$

$$\times \left[1 - e^{-\mu_{mn} t} \left(\cos \omega_{mn} t + \frac{\mu_{mn}}{\omega_{mn}} \sin \omega_{mn} t \right) \right] \sin k_m x \sin p_n y,$$

$$\text{де} \quad \omega_{mn} = \sqrt{\omega_{mn}^2 - \mu_{mn}^2}.$$

Як і у загальному випадку, вибором різниці потенціалів відповідно до залежності

$$V_0 = \frac{2p_0}{\gamma_{11}(h_1 + h_2)(k_m^2 + p_n^2)},$$

Список використаних джерел

1. Карнаухов В.Г., Михайленко В.В. Нелинейная термомеханика пьезоэлектрических неупругих тел при моногармоническом нагружении. - Житомир: ЖТТУ, 2005. - 428 с.

можна виключити будь-яку гармоніку в співвідношенні (16). Компенсуючи основну гармоніку, ми суттєво зменшимо прогин пластини. Аналітичний розв'язок (16) може бути еталоном при розробці чисельних методів моделювання демпфірування коливань за допомогою п'єзоелектричних включень, зокрема і методу скінченних елементів. Для моделі Фойгта варіаційне рівняння в просторі зображень по Лапласу має вигляд:

$$\delta \bar{\mathcal{E}}(x, y, z) = 0, \quad (17)$$

де

$$\bar{\mathcal{E}} = \frac{1}{2} \int_F \left\{ (D_{11}^0 + s D_{11}^1) \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial x^2} \right)^2 + 2(D_{12}^0 + s D_{12}^1) \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial y^2} + (D_{22}^0 + s D_{22}^1) \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial y^2} \right)^2 + 2(D_{66}^0 + s D_{66}^1) \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial x \partial y} \right)^2 + \tilde{\rho} s^2 \bar{w} - 2\bar{p}_0 \bar{w} - 2M_0 \left(\frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{w}}{\partial y^2} \right) \right\} dx dy.$$

Для розв'язку задачі (17) можна застосувати описаний вище метод скінченних елементів. На основі вказаного вище підходу можна реалізувати алгоритми розв'язку динамічних задач як з повністю, так і з частково електродованими поверхнями.

4. Висновки

У випадку врахування впливу п'єзовключень на жорсткісні характеристики пасивної пластини та при інших типах граничних умов (наприклад, при жорсткому закріпленні торців) для розв'язку задачі демпфірування був застосований метод скінченних елементів. Розглянуто розв'язки конкретних задач демпфірування стаціонарних та нестаціонарних коливань пластин з використанням як аналітичних, так і скінченно-елементних методів. На основі вказаного вище підходу можна реалізувати алгоритми розв'язку динамічних задач як з повністю, так і з частково електродованими поверхнями.

References

1. KARNAUKHOV, V. G., MIKHAILENKO, V. V. (2005). *Nelineynaya termomekhanika piezoelektricheskikh neuprugikh tel pri monogarmonicheskoy nagruzhenii*. Zhitomir: ZHTTU.

Надійшла до редколегії 23.12.18

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 532.64.

Бур'ян С. А.¹, асп.,
Гребньов О.А.¹, асп.,
Сисоєв В.М.¹, д.ф.-м.н., проф.,
Ісаєв М.В.², к.ф.-м.н.

Особливості оцінки контактного кута на наномасштабі

¹Фізичний факультет, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13, e-mail: serg.buran@gmail.com
²LEMETA, Université de Lorraine, CNRS (UMR 7563), 2 Avenue de la Forêt de Haye, BP 90161, 54505, Vandoeuvre-lès-Nancy, France)

S.A. Burian¹, PhD stud.,
O.A. Hrebnov¹, PhD stud.,
V.M. Sysoev¹, Dr.Sci., Prof.,
M.V. Isaiev², PhD.

The features of the contact angle evaluation at the nanoscale

¹Faculty of Physics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, 64/13, Volodymyrska str., 01601, Kyiv, Ukraine, e-mail: serg.buran@gmail.com
²LEMETA, Université de Lorraine, CNRS (UMR 7563), 2 Avenue de la Forêt de Haye, BP 90161, 54505, Vandoeuvre-lès-Nancy, France)

Інформація про явище змочування важлива в різних аспектах науки про поверхню. Одним з маркерів, який зазвичай використовується для опису характеристик змочування є контактний кут змочування. Оцінка величини контактного кута змочування на макромасштабі є складною проблемою через гістерезис між відступаючим та наступаючим контактними кутами. У той же час, ситуація значно складніша для наноскопічної краплини через відчутну товщину міжфазного регіону, що призводить до неоднозначності у виборі поверхні поділу, та як наслідок, до неоднозначності визначення контактного кута. У даній роботі змодельовано методами молекулярної динаміки краплину циліндричної форми та шар рідини аргону, виміряно їх мапи густини та мапи компонент тензора напружень. На основі аналізу цих мап, у рамках підходу Гіббса, визначено положення еквімолярних поверхонь та поверхонь натягу на межі рідина – газ та рідина – тверде тіло. Для циліндричної нанокраплини оцінені рівноважні контактні кути змочування, що утворені відповідними поверхнями поділу. Виміряні кути відрізняються більше ніж на 10%.

Ключові слова: явище змочування, нанокраплина, поверхневий натяг, поверхня натягу, гідрофобні сили.

The information regarding the wetting characteristic is important in various aspects of surface science. One of the markers that more frequently uses for describing of wetting characteristics is the wetting angle. Even an estimation of the wetting at the macroscale is a tricky issue, because of the hysteresis between receding and advancing values presence. In the same time, the situation is more complicated for a nanoscopic droplet due to the tangible thickness of the interphase region, what causes an uncertainty of the dividing surface determination, as a consequence it causes an uncertainty of the contact angle determination. In this work using methods molecular dynamics we performed simulations of the cylindrical nanodroplet and the layer of the argon fluid. The density maps and the maps of tension tensor were also measured. Basing on the analysis of the maps within the framework of the Gibbs approach, the equimolar surfaces and the surfaces of tension on the liquid-gas interface and the liquid-solid interface was determined. For the cylindrical nanodroplet, the equilibrium contact wetting angles formed by the corresponding dividing surfaces were estimated. The measured angles differ by more than 10%.

Key Words: wetting, nanodroplet, surface tension, surfaces of tension, hydrophobic forces.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Контактний кут є однією з ключових характеристик при описі явища змочування [1]. Зазвичай [2], контактний кут визначається в кожній точці лінії контакту трьох фаз термодинамічної системи як двограний кут між площинами, дотичними до поверхонь поділу двох сусідніх фаз. У макроскопічних об'єктів товщина міжфазного регіону є нехтовно малою в порівнянні із характерними лінійними розмірами досліджуваних фізичних систем, наприклад, такими, як радіус кривизни поверхні поділу фаз. Саме завдяки цьому, у межах роздільної здатності відповідних вимірювальних приладів, положення поверхні поділу макроскопічних систем визначається однозначно, і тому можна вважати, що поверхня поділу цілком збігається з міжфазним регіоном. Відповідно, з'ясування положення поверхні поділу макроскопічних фізичних тіл – не викликає значних труднощів і є переважно технічною задачею [2].

Проте, слід мати на увазі, що в реальних фізичних системах, суміжні гомогенні термодинамічні фази переходять одна в іншу не різко, а поступово, тобто так, що густина та компоненти тензора тиску змінюються плавно, в межах деякого перехідного регіону, такого, що завжди має деяку скінченну й не нульову товщину та об'єм [3,4]. У зв'язку з цією особливістю, немає суттєвої необхідності розрізняти тримірний міжфазний перехідний регіон (інтерфазу) та двомірну математичну поверхню поділу (інтерфейс), яка різко розділяє дві сусідні гомогенні підсистеми [4] у макросистемах. Проте, характерні величини лінійних розмірів наномасштабних об'єктів можуть набувати значень порядків товщини перехідного регіону міжфазної області (інтерфазу). Така обставина призводить до принципових труднощів при спробі однозначно встановити положення поверхні поділу, як деякої математичної поверхні нульової товщини, і тому, виникає необхідність розрізняти поняття поверхні поділу термодинамічних фаз від поняття перехідного регіону між сусідніми фазами термодинамічної системи.

У літературі пропонуються декілька підходів до визначення положення поверхні поділу фаз на межі рідина – газ та рідина – тверде тіло, які можуть давати неоднозначні результати. Зокрема, при дослідженнях шляхом комп'ютерних симуляцій,

часто за поверхню поділу сусідніх фаз однокомпонентних систем обирають поверхню ізогустини, значення густини якої розраховують спираючись на різні міркування. Так в роботі [5] будується декілька ліній ізогустини, які апроксимуються колами, і результуючий кут змочування розглядається як середній кут між різними ізопверхнями. Інші автори [6] вважають, що поверхня поділу проходить там, де значення густини є рівним половині значення густини рідкої фази. Також є такі автори, що у своїх дослідженнях [7] положення поверхні визначають шляхом апроксимації профілю густини циліндричного шару краплини емпіричними формулами із використанням густини рідкої та газоподібної фаз; та для визначення контактного кута користуються різницями в положенні поверхонь поділу Гіббса у двох найближчих до твердої поверхні шарах.

Окрім того, іншою особливістю є те, що біля поверхні твердої підкладки в речовині краплини виникають значні осциляції густини які суттєво спотворюють ізогустинні поверхні відхиляючи їх форму від циліндричної чи сферичної. Для уникнення впливу цих осциляцій на процедуру апроксимації, зазвичай більшість авторів не враховують ту частину краплини, де густина зазнає значних осциляцій значення.

Суттєво спростити вирішення таких проблем допомагає застосування методу поверхні поділу Гіббса, в рамках якого немає необхідності з'ясовувати деталі особливостей мікроскопічної поведінки профілю густини та локальних значень компонентів тензору тиску в міжфазному регіоні [4,8,9].

У цій роботі проведено молекулярно-динамічне моделювання явища змочування на прикладі аргонової наноплівки та нанокраплини циліндричної форми, з метою визначення впливу особливостей нанорозмірних об'єктів на значення рівноважного контактного кута змочування. Вибір циліндричної морфології нанокраплини пов'язаний з подальшим спрощенням аналізу у зв'язку з особливостями впливу лінійного натягу контактної лінії трьох фаз притаманними саме прямій трьохфазній лінії. Для визначення рівноважного контактного кута змочування розраховано положення еквімолярної поверхні поділу та поверхні натягу в рамках підходу Гіббса.

Експериментальна частина

Нами були розглянуті наноплівка та краплина аргону циліндричної форми, поміщені у зовнішнє неоднорідне силове поле. Усі розрахунки методом молекулярної динаміки (МД), виконані з використанням пакету LAMMPS (Largescale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator). Рідина аргону перебуває в механічній та хімічній рівновазі зі своєю насиченою парою та зрівноважена потенціалом силового поля. Температура, за якої проводились симуляції, обрана з міркувань максимального наближення до реальних фізичних умов співіснування трьох агрегатних станів аргону, тобто, температура потрійної точки аргону – $T = 83,8058$ К. Для молекулярно-динамічного моделювання було обрано умови, які відповідають канонічному ансамблю Гіббса. Вибір цього статистичного ансамблю, обумовлений тим, що контрольованість об'єму системи спрощує процедуру молекулярно-динамічного розрахунку профілю густини та профілю компонент тензора тиску.

Для моделювання наноплівки було розглянуто симуляційний бокс із розмірами $78,75 \times 78,75 \times 262,5$ Å та з періодичними граничними умовами у двох напрямках, дотичних до поверхні плівки (x, y), а у напрямку z використовувалися граничні умови, які відповідають дзеркальному відбиванню. Наноплівка складалася із 17241 атома. Для досягнення рівноваги, системи нагрівалася від 1 К до температури потрійної точки протягом 1 нс і ще протягом 6 нс тривала термалізація.

Для моделюванні циліндричної нанокраплини було створено бокс із розмірами $78,75 \times 525 \times 262,5$ Å з періодичними граничними умовами вздовж осі краплини. У цьому випадку система складалася із 2535 атомів. Вона нагрівалася від 1 К до температури потрійної точки протягом 0,05 нс і протягом 1 нс проводилась термалізація.

Були отримані усереднені по часу мапи профілів густини, компоненти тензора напружень та сітка Вороной. Вимірювані величини знімалися кожну 1 нс та усереднювали протягом 5 нс, тривимірний простір був поділений на паралелепіпеди із розмірами $0,25 \times 0,25 \times 78,75$ Å. Компоненти тензора тиску отримані шляхом ділення компонент тензора напружень на сітку Вороной. Під час проведення моделювання, вимірювалися лише 6 із 9 компонент тензора тиску (напружень), оскільки вважалось, що

тензор симетричним, що допустимо у рамках наближення сферичних молекул.

Положення поверхонь поділу можна визначити використовуючи метод Гіббса [4,9], який дозволяє розрахувати положення еквімолярної поверхні поділу та положення поверхні натягу на межі поділу фаз.

Положення плоскої еквімолярної поверхні, Z_e , можна визначити за формулою:

$$Z_e = \frac{1}{n_\beta - n_\alpha} \int_{Z_\alpha}^{Z_\beta} z \frac{\partial n(z)}{\partial z} dz \quad (1)$$

де, $n(z)$ – концентрація речовини в точці з координатою z , n_α – концентрація об'ємної частини рідкої фази, n_β – концентрація об'ємної частини газоподібної фази, Z_α – це координата, яка відповідає точці простору де, значення концентрації стає рівним об'ємній концентрації рідкої фази $n(Z_\alpha) \equiv n_\alpha$, Z_β – об'ємній концентрації газової фази, $n(Z_\beta) \equiv n_\beta$.

Для визначення розташування плоскої поверхні натягу, Z_s спершу необхідно розрахувати поверхневий натяг $\gamma_{\alpha\beta}$ між фазами α та β :

$$\gamma_{\alpha\beta} = \int_{Z^\alpha}^{Z^\beta} (P_N(z) - P_T(z)) dz, \quad (2)$$

де P_N – нормальна компонента тензора тиску, P_T – тангенційна компонента тензора тиску у реальній системі.

Тоді, Z_s , визначається із формули:

$$\gamma_{\alpha\beta} Z_s = \int_{Z^\alpha}^{Z^\beta} (P_N(z) - P_T(z)) z dz. \quad (3)$$

Різниця величини Z_e та Z_s називається δ -поправкою Толмена:

$$\delta = Z_e - Z_s \quad (4)$$

Для спрощення проведення розрахунків, будемо вважати, що еквімолярна поверхня та поверхня натягу є еквідистантними та коаксіальними поверхнями у тій області, де осциляції густини, спричинені полем підкладки, не перевищують значення флуктуації густини по всьому досліджуваному поперечному перерізу краплини. Саме для цієї частини нанокраплини, положення еквімолярної поверхні визначено шляхом апроксимації колом ізоденсизації із значенням густини $0,001 \pm 0,0001$ Å⁻³, що приблизно відповідає значенню половини густини рідкої фази. Радіус поверхні натягу нанокраплини розраховуємо

додавши до радіусу еквімолярної поверхні значення δ -поправки Толмена. Поверхні поділу на межі рідина – тверде тіло є плоскими, тому їх положення легко визначається за формулами 1–3.

Результати та обговорення

Розглянемо міжфазний регіон рідина газ. За формулою (1) можна розрахувати значення положення плоскої еквімолярної поверхні поділу. Для змодельованої нами наноплівки на межі рідина – газ в координатах симуляційного боксу це положення рівне $140 \pm 0,5 \text{ \AA}$ (рис.1.).

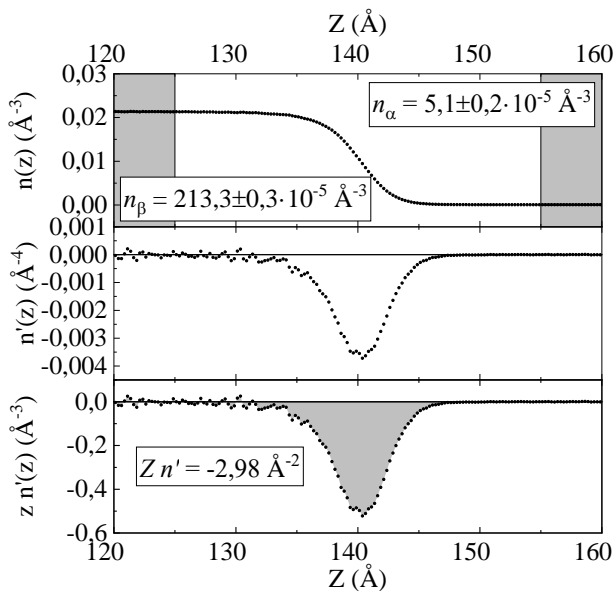


Рис. 1. Чисельна концентрація речовини (зверху), її похідна по координаті z (посередині) та добуток похідної на відповідну координату (знизу) на межі поділу рідина-газ наноплівки.

Із рисунку 2 видно, що арифметична площа під кривою на межі поділу тверда підкладка – рідина (формула 2) дає значення відповідного компонента тензора поверхневого натягу, так само як і на межі рідина-газ. Із аналізу графіка функції дотичної та нормальної компонент тензора тиску на межі рідина – тверде тіло та рідина – газ (рис. 2.), з використанням формули (2) та формули (3), визначається положення поверхні натягу, яке в координатах симуляційного боксу рівне $132 \pm 0,5 \text{ \AA}$.

Із отриманих значень положень вищезгаданих поверхонь поділу за формулою (4) розраховано значення поправки Толмена – $\delta = 8 \pm 1 \text{ \AA}$. Додатне

значення величини δ -поправки Толмена означає, що поверхня натягу знаходиться на відстані 8 \AA від еквімолярної поверхні поділу у бік рідини, що узгоджується із відомими літературними результатами [8].

Для циліндричної нанокраплини, аналізуючи вузький регіон біля осевого перерізу, перпендикулярного до основи краплини, було зроблено аналогічні розрахунки, як і для наноплівки. Значення величини поправки Толмена у межах похибки співпадає із значення для наноплівки на межі рідина – газ.

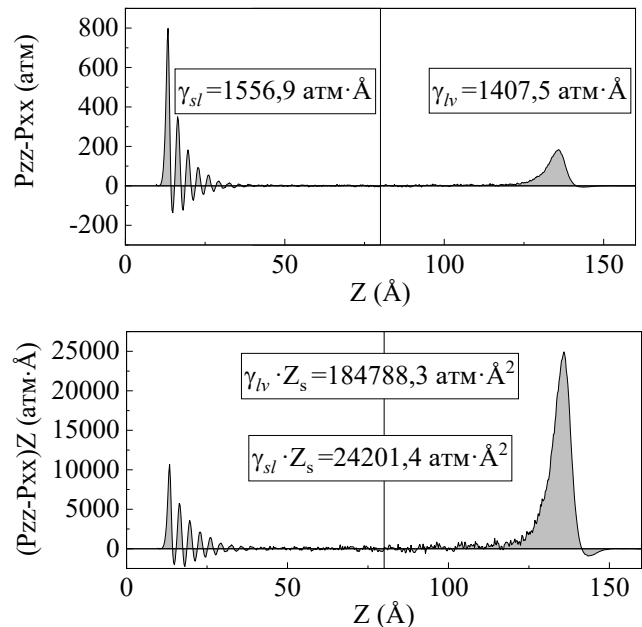


Рис. 2. Різниця нормальної та тангенційної компонент тензора тиску у одному із напрямків дотичних до плоскої поверхні поділу та добуток цього значення на відповідну йому координату.

Як видно із рисунків 3 та 4, контактні кути, котрі виміряні між еквімолярними поверхнями на межі рідина – газ та рідина – тверде тіло та відповідними поверхнями натягу, виявляються відмінними, а саме $89,4 \pm 0,3^\circ$ та $101,3 \pm 0,2^\circ$ відповідно. Зважаючи на те, що товщина міжфазного регіону практично незмінна при зміні кривизни поверхні поділу, то очевидно, що ця відмінність в значеннях контактних кутів визначених між поверхнями натягу та еквімолярними поверхнями поділу, відповідно, зростає при зменшенні розмірів поперечного перерізу краплини та стає зовсім непомітною при макроскопічних розмірах.

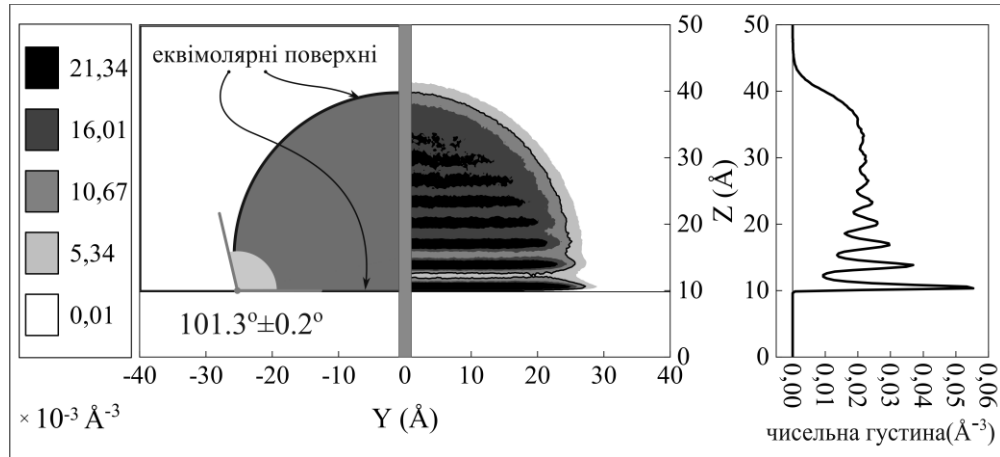


Рис. 3. Схематичне зображення положення еквімолярних поверхонь, розрахованих за методом Гіббса (зліва) в референтній системі, яка моделює реальну краплину, та усереднена мапа розподілу густини в площині поперечного перерізу циліндричної нанокраплини (справа).

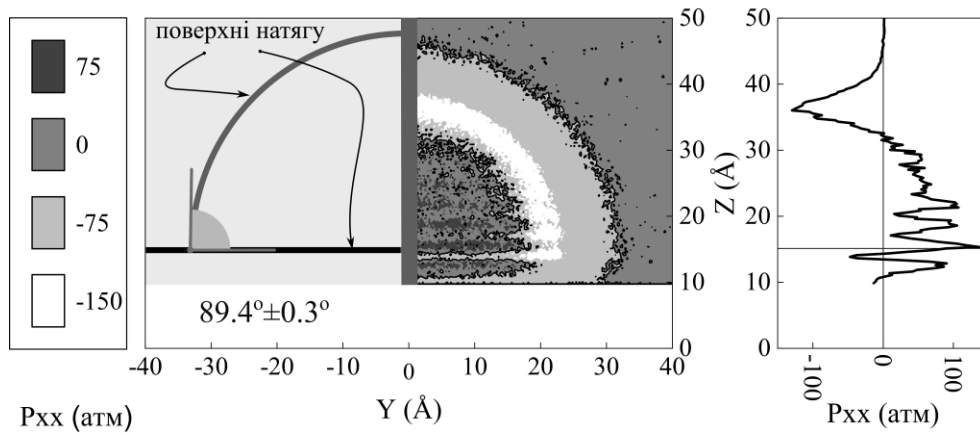


Рис. 4. Схематичне зображення положення поверхонь натягу, розрахованих за методом Гіббса (зліва) в референтній системі, яка моделює реальну краплину, та усереднена мапа розподілу поздовжньої компоненти тензора тиску в площині поперечного перерізу циліндричної нанокраплини (справа).

Висновки

На наномасштабі товщина міжфазного регіону має порядок характерних лінійних розмірів об'ємної частини наноб'єкта, що призводить до неоднозначності при виборі положення поверхні поділу, як наслідок, контактного кута, оскільки міжфазну область не можна вважати математичною поверхнею. Тому, на наномасштабі вибір поверхні поділу є критичним для визначення контактного кута, який є основною характеристикою явища змочування. Ми пропонуємо послідовно використовувати метод поверхні поділу Гіббса в рамках якого поверхня натягу забезпечує механічну еквівалентність модельного представлення та

реальної фізичної системи. Тому ми під контактним кутом розуміємо двограний кут на трифазній лінії натягу між поверхнями дотичними до відповідних поверхонь натягу. У даній роботі, провівши молекулярно динамічні симуляції наноплівки та циліндричної нанокраплини аргону, було визначено положення поверхонь поділу. Поправка Толмена, при температурі потрійної точки скала 8 Å, що складає близько чверті радіуса поверхні натягу нанокраплини. Для циліндричної нанокраплини було визначено величини контактних кутів, утворених еквімолярними поверхнями та поверхнями натягу, $89,4 \pm 0,3^\circ$ та $101,3 \pm 0,2^\circ$ відповідно.

Список використаних джерел

1. J. Drelich, E. Chibowski, and A. Marmur, "Contact angles : history of over 200 years of open questions," no. March, 2019.
2. A. Marmur, "Soft contact : measurement and interpretation of contact angles," pp. 12–17, 2006.
3. A. W. Adamson, *Physical chemistry of surfaces*. New York, Chichester, Weinheim, Brisbane, Singapore, Toronto: A Wiley-Interscience Publication, 1997.
4. G. G. Láng, "Basic interfacial thermodynamics and related mathematical background," *ChemTexts*, vol. 1, no. 4, p. 16, Dec. 2015.
5. T. Werder, et al. On the water– carbon interaction for use in molecular dynamics simulations of graphite and carbon nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2003
6. G. Hong-Kai and F. Hai-Ping, "Drop Size Dependence of the Contact Angle of Nanodroplets," *Chinese Phys. Lett.*, vol. 22, no. 4, pp. 787–790, Apr. 2005.
7. T. Ingebrigtsen and S. Toxvaerd, "Contact angles of Lennard-Jones liquids and droplets on planar surfaces," *J. Phys. Chem. C*, vol. 111, no. 24, pp. 8518–8523, 2007.
8. S. Ono and S. Kondo, "Molecular Theory of Surface Tension in Liquids," in *Structure of Liquids / Struktur der Flüssigkeiten*, S. Flügge, Ed. Berlin, Heidelberg: Springer, 1960, pp. 134–280.
9. J. S. Rowlinson and B. Widom, *Molecular Theory of Capillarity*. Oxford: Dover Publications, 2013.

References

1. DRELICH, J., CHIBOWSKI, E. and MARMUR A. (2019) Contact angles : history of over 200 years of open questions. *Surface Innovations*. p.1-25.
2. MARMUR A. (2006) Soft contact: measurement and interpretation of contact angles. *Soft Matter* 2(1). p.12-17.
3. ADAMSON, A. W. and GAST, A. P. (1997) Electrical aspects of surface chemistry. *Physical chemistry of surfaces*. p. 185-187.
4. LÁNG, G. G. (2015) Basic interfacial thermodynamics and related mathematical background. *ChemTexts*. 1(4). p. 16.
5. WERDER, T. et al. (2003) On the water– carbon interaction for use in molecular dynamics simulations of graphite and carbon nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry B*. 107(6). p. 1345-1352.
6. HONG-KAI, G. and HAI-PING, F. (2005) Drop size dependence of the contact angle of nanodroplets. *Chinese Physics Letters*. 22(4). p. 787.
7. INGEBRIGTSEN, T. and TOXVAERD, S. (2007) Contact angles of Lennard-Jones liquids and droplets on planar surfaces. *The Journal of Physical Chemistry C*. 111(24). p. 8518-8523.
8. ONO, S. and KONDO, S. (1960) Molecular theory of surface tension in liquids. In *Structure of Liquids/Struktur der Flüssigkeiten*. Springer, Berlin, Heidelberg. p. 134-280.
9. ROWLINSON, J. S. and WIDOM B. (2013) *Molecular Theory of Capillarity*. Oxford: Dover Publications

Надійшла до редколегії 27.04.18

УДК 532.783

Грідякіна О. В.¹, к.ф.-м.н.,
Бордюг Г.Б.², к.ф.-м.н.,
Білоус О. І.³, д.ф.-м.н., доц.

O. V. Gridyakina¹, PhD.,
H. B. Bordyuh², PhD.,
O. I. Bilous², Dr. Sci.

Нелінійно-оптичні властивості рідкокристалічних середовищ на основі метал-алканоатів

Nonlinear optical properties of metal-alkanoate liquid crystalline media

^{1,2,3}Національний авіаційний університет,
03058, м.Київ, просп. Космонавта Комарова, 1,
e-mail: ¹morhin@ukr.net
²a.bordyuh@gmail.com
³bilous2013@gmail.com

^{1,2,3}National Aviation University, 03058, Kyiv,
Kosmonavta Komarova ave. 1,
e-mail: ¹morhin@ukr.net
²a.bordyuh@gmail.com
³bilous2013@gmail.com

В роботі наведено результати оптичних та нелінійно-оптичних досліджень властивостей ліотропних іонних рідких кристалів капрілату калію, допованих електорохромними домішками віологенів, та смектичних стекло термотропних іонних рідких кристалів алканоатів кобальту. Показано, що досліджувані матеріали характеризуються кубічною оптичною нелінійністю і мають значення кубічної нелінійної сприйнятливості $\chi^{(3)}$ та гіперполяризованості γ , наближені до кращих характеристик органічних барвників. Запропоновано механізм нелінійного відгуку, пов'язаний з нелінійною поляризацією π -електронів у полі лазерного випромінювання.

Ключові слова: іонний рідкий кристал, віологен, оптична спектроскопія, оптична нелінійність.

This work presents the analysis of experimental data on studies of optical and nonlinear optical properties of lyotropic ionic liquid crystals of potassium caprylate doped with electrochromic viologen admixtures, and smectic glasses of thermotropic ionic liquid crystals of cobalt alkanoates homologous series (number of carbon atoms in alkanoate chain $n = 7, 9, 11$) and their multicomponent mixtures. Prior to performing nonlinear optical experiment the optical absorption spectra for all samples were investigated. Laser induced dynamic grating recording under the action of nanosecond laser pulses was realized, observed and analyzed for the proposed absorptive media. It was discovered that studied materials are characterized by cubic optical nonlinearity and have values of cubic nonlinear susceptibility $\chi^{(3)}$ and hyperpolarizability γ comparable with the best characteristics of organic dyes. The possible mechanism of nonlinear response in studied systems was considered on the base of obtained data. The nonlinear response mechanism is connected with nonlinear polarization of π -electrons in the field of laser radiation.

Key Words: ionic liquid crystal, viologen, optical spectroscopy, optical nonlinearity.

Статтю представив академік НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Окрім традиційного використання в дисплейних технологіях рідкокристалічні матеріали все більше застосовують в нанотехнологіях, оптоелектроніці, лазерній техніці, фотоніці та голографічному записі. Зокрема в останньому випадку свою ефективність показали іонні рідкі кристали на основі алканоатів металів, які здатні утворювати як ліотропну, так і термотропну мезофазу [1]. Термотропні іонні рідкі кристали (ТІРК) здатні легко переохолоджуватись з утворенням смектичного скла та мають власне поглинання у видимому діапазоні довжин хвиль [2].

Поглинання ліотропних іонних рідких кристалів (ЛІРК) зумовлене введенням барвників або фото-та електрочутливих домішок, які не порушують рідкокристалічну структуру матричної речовини [3]. Завдяки поглинанню в області лазерного випромінювання такі рідкокристалічні матеріали характеризуються великим і швидким нелінійно-оптичним відгуком і є перспективними середовищами для здійснення голографічного запису.

Об'єкти та методи дослідження

Зразки для проведення оптичних та нелінійно-оптичних досліджень отримували наступним чином:

1) ЛРК, утворений змішуванням порошку каприлату калію з водою у ваговому співвідношенні 1:1 ($C_7H_{15}COOK^+ \cdot H_2O$), містив 2% мас. електрохромних домішок двох сполук із класу віологенів: N,N'-дигептил-4,4'-дипіридил диброміду ($ГД^{2+}2Br^-$) та N,N'-ди(2-карбоксіетил)-4,4'-дипіридил дихлориду ($КЕД^{2+}2Cl^-$), які розрізняються замісниками при атомах азоту та протионами. Така концентрація домішки дозволяє зберегти РК-структуру [3-5], водночас забезпечуючи електрохромні властивості зразків, які полягають у здатності забарвлюватися під дією зовнішнього електричного поля внаслідок відновлення молекул віологенів.

2) Алканоати кобальту у вигляді полікристалічного порошку нагрівали вище температури переходу кристал-мезофаза, а потім швидко охолоджували до кімнатної температури, отримуючи смектичне скло. Такі стекла термотропних іонних рідких кристалів були отримані для наступних сполук: трьох представників гомологічного ряду алканоатів кобальту ($C_nH_{2n+1}COO^-$) $_2Co^{2+}$ ($n=7, 9, 11$); бінарних сумішей $Co, Li|(C_7H_{15}COO)_2$ (0,5:0,5 молярної концентрації) та $Co, K|(C_7H_{15}COO)_2$ (0,5:0,5 молярної концентрації); потрійної суміші $Co, Li, K|(C_7H_{15}COO)_2$ (0,5:0,25:0,25 молярної концентрації). У попередніх роботах було показано, що всі досліджувані речовини під час плавлення утворюють рідкий кристал типу смектик А [2, 6] і здатні утворювати стабільне смектичне скло.

Всі дослідження проводили за кімнатної температури у скляних сандвіч-комірках, які у випадку зразків ЛРК-віологен були додатково вкриті з внутрішнього боку шаром ІТО-електродів, щоб забезпечити можливість подавання напруги. Товщину зразків задавали за допомогою тefлонових спейсерів, а самі комірочки заклеювали по периметру, щоб уникнути доступу повітря та запобігти псуванню зразків.

Для дослідження оптичних властивостей застосовували метод оптичної спектроскопії і отримували спектри поглинання зразків у видимому діапазоні.

Для дослідження нелінійно-оптичних властивостей та визначення основних голографічних характеристик зразків застосовували методи динамічної голографії та вимірювання нелінійного пропускання середовища. Голографічний запис ґраток здійснювали на основі двопрменевої схеми, використовуючи випромінювання другої

гармоніки імпульсного Nd:YAP лазера, що працював в режимі модуляції добротності (TEM_{00} мода, довжина хвилі $\lambda = 539,8$ нм, тривалість одного імпульсу $\tau = 20$ нс, частота імпульсів $\nu = 3$ Гц). Лінійно поляризоване в горизонтальній площині лазерне випромінювання розділялося на два промені приблизно однакової інтенсивності, які зводились на комірці зі зразком під заданим кутом. Досліджували ефективність самодифракції, змінюючи кут зведення променів та інтенсивність лазерного випромінювання.

Для дослідження кінетики затухання ґраток в мікросекундному діапазоні записані голографічні ґратки зчитували тестуючим неполяризованим випромінюванням неперервного He-Ne лазера (потужність $P = 2$ мВт, $\lambda = 632,8$ нм).

Експериментальні дані

Оптичні властивості

Поглинання композитів ЛРК-віологен зумовлене домішками віологенів, молекули яких відновлюються під дією зовнішнього поля і в залежності від величини поданої напруги, можуть перебувати в трьох формах: дикатіон віологену (безбарвний), синій катіон-радикал та червоний димер. У разі внесення віологену $ГД^{2+}2Br^-$ у ліотропну рідкокристалічну матрицю його відновлення відбувається поетапно та характеризується утворенням як катіон-радикалів, так і димерів.

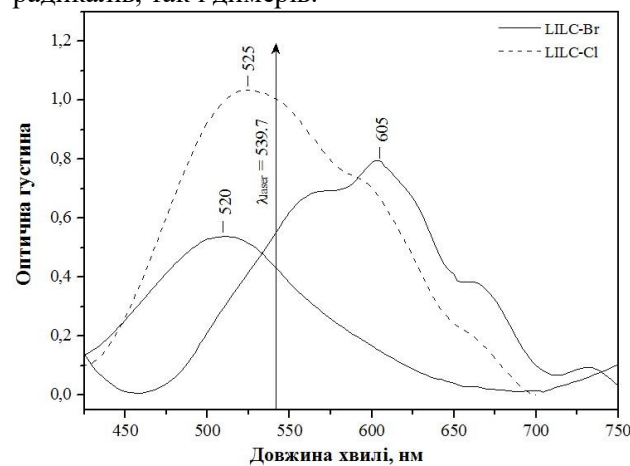


Рис. 1. Спектр поглинання зразків ЛРК- $ГД^{2+}2Br^-$ (суцільна лінія) та ЛРК- $КЕД^{2+}2Cl^-$ (пунктирна лінія).

Спектр поглинання композита ЛРК- $ГД^{2+}2Br^-$ у залежності від прикладеної напруги може мати смуги з максимумом на ~ 605 нм ($U = 2$ В, синій колір) або ~ 520 нм ($U = 4$ В, червоний колір). Обидві відновлені форми віологенів у композиті ЛРК- $КЕД^{2+}2Cl^-$ утворюються одночасно, а його спектр характеризується

смугою поглинання з основним максимумом на ~ 525 нм ($U = 3-3,5$ В, фіолетовий колір) (Рис. 1).

Усі досліджувані смектичні стекла алканоатів кобальту також поглинають світло у видимому діапазоні (Рис. 2). Це поглинання можна розглядати в термінах теорії поля лігандів [7, 8] як наслідок збудження октаедричних (координаційне число = 6) комплексів іонів кобальту, для яких зафіксовано два характерних електронних переходи. Максимум ~ 530 нм відповідає електронному переходу ${}^4T_{1g}({}^4F) \rightarrow {}^4T_{1g}({}^4P)$, а максимум ~ 565 нм – ${}^4T_{1g}({}^4F) \rightarrow {}^4A_{2g}({}^4F)$.

У сумішах зафіксовано вигинання смуги поглинання в області ~ 620 нм (${}^4A_2({}^4F) \rightarrow {}^4T_1({}^4P)$ перехід). Це свідчить, що разом з октаедричними комплексами в зазначених сумішах ймовірно існують також комплекси з тетраедричною координацією. Коефіцієнт поглинання α бінарних та потрійних систем, на основі на CoC_8 в 2-3 рази більше, ніж для чистого CoC_8 .

Нелінійно-оптичні властивості

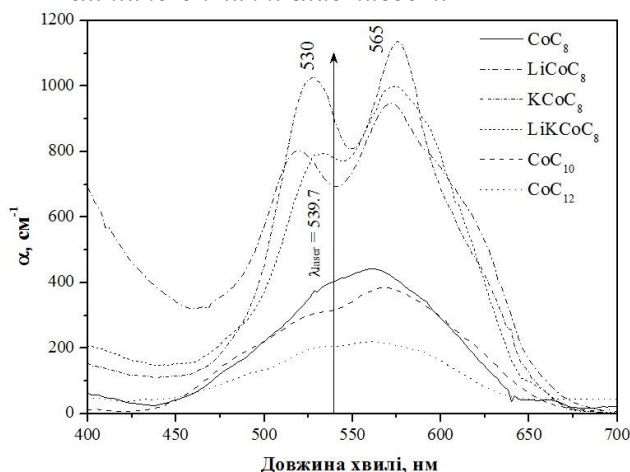


Рис. 2. Спектри поглинання смектичних стекел ТІРК.

Для запису дифракційних динамічних ґраток у зразках стекел ТІРК та композитів ЛІРК-віологен було достатньо одного лазерного імпульсу, для всіх зразків спостерігався ефект самодифракції. При цьому зазвичай спостерігали кілька дифракційних порядків. Цей факт, а також малість величини параметру Кука-Кляйна ($Q < 0,1$) вказують на те, що записані ґратки є тонкими. Дифракційні ґратки записувалися внаслідок модуляції комплексного показника заломлення в інтерференційному полі двох зведених на зразку лазерних променів.

Спочатку оцінювали залежність оптичної густини зразків від інтенсивності лазерного випромінювання, щоб визначити природу

записуваних ґраток. У робочому діапазоні інтенсивностей нелінійне поглинання неістотне, тобто записані ґратки в обох випадках були переважно фазовими. При цьому оптична густина зразків ЛІРК-віологен за робочої інтенсивності випромінювання дорівнювала $D = 0,45-0,46$, а для зразків ТІРК – $D = 1,0-1,1$.

Дифракційну ефективність η (відношення I_1/I_0) стекел ТІРК і композитів ЛІРК-віологен вимірювали в першому порядку самодифракції, і для всіх досліджуваних зразків вона квадратично залежала від інтенсивності записуючого лазерного випромінювання, що вказує на наявність у зразках кубічної оптичної нелінійності. При цьому зразки ЛІРК-ГД²⁺2Вг⁻, які містили димери віологенів, мали вдвічі більшу дифракційну ефективність, ніж ті самі зразки, які містили катіон-радикали, а смектичні стекла індивідуальних гомологів алканоатів кобальту мали більш високі значення дифракційної ефективності у порівнянні із сумішами. Експериментальні дані, отримані в результаті серії досліджень з різними зразками, показали задовільну повторюваність результатів [6, 9] Типовий графік дифракційної ефективності для досліджених зразків наведено на Рис. 3.

При дослідженні кінетики стирання записаних ґраток для всіх зразків спостерігали експоненціальну часову залежність інтенсивності в першому порядку дифракції (Рис. 4). Для смектичних стекел ТІРК стала затухання τ для періоду ґратки $L = 16$ мкм становила 60 мкс, а

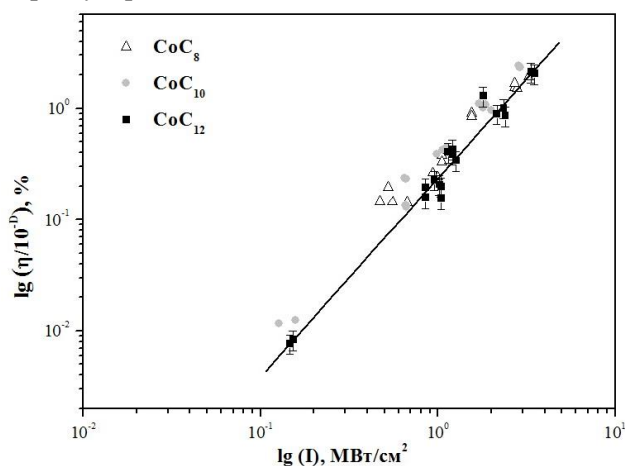


Рис. 3. Залежність дифракційної ефективності (η) фазової ґратки від інтенсивності лазерного випромінювання для композитів ЛІРК-віологен стала затухання τ для періоду ґратки $L = 15$ мкм становила 25 мкс. Така залежність характерна для теплових ґраток, які виникають в зразках при поглинанні записуючого лазерного випромінювання. Унаслідок інерційності фотореєструючої системи

відстежували релаксацію ґраток, починаючи з 0,5 мкс, тобто спостерігали стирання залишкових теплових ґраток у мікросекундному діапазоні часу. Але, порівняння дифракційної ефективності теплової ґратки η_T з дифракційною ефективністю ґратки, записаної в режимі самодифракції η , свідчить, що $\eta_T \ll \eta$ ($\eta/\eta_T > 100$), тобто записані в режимі самодифракції дифракційні ґратки не зумовлені тепловим механізмом.

Обговорення результатів

Основними показниками наявної у досліджуваних зразках кубічної оптичної нелінійності є коефіцієнт нелінійної рефракції n_2 та відповідне значення кубічної нелінійної

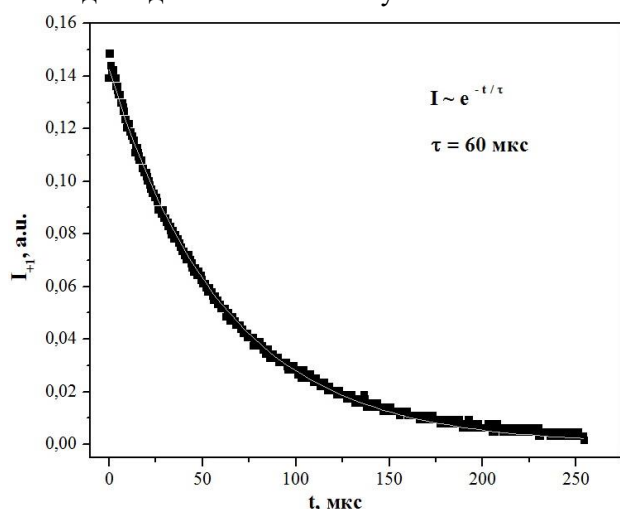


Рис. 4. Кінетика стирання записаних ґраток у мікросекундному діапазоні для зразка смектичного скла октаноату кобальту. сприйнятливості $\chi^{(3)}$. Коефіцієнт нелінійної рефракції n_2 визначали за експериментальною залежністю $\eta = f(I^2)$ за виразом:

$$|n_2| = \frac{\lambda}{\pi \cdot d \cdot m \cdot (I_1 + I_2)} \cdot \sqrt{\frac{\eta}{T}}, \quad (1)$$

де λ – довжина хвилі лазерного випромінювання, d – товщина, на якій відбувався нелінійний набіг фази (товщина комірки у випадку смектичних стекол або фоточутливого шару продуктів відновлення віологенів у випадку композитів ЛПК-віологен), m – глибина модуляції, I_1, I_2 – інтенсивності лазерних пучків, які інтерферують на досліджуваному зразку, T – пропускання.

Значення гіперполяризованості γ та кубічної нелінійної сприйнятливості $\chi^{(3)}$ за обраховували формулами:

$$\gamma = \frac{\chi^{(3)}}{N \cdot L^4}, \quad (2)$$

$$\chi^{(3)} = n_2 \cdot \epsilon_0 \cdot c \cdot (n_0)^2 = \gamma \cdot N \cdot L^4 \quad (3)$$

де N – концентрація (нелінійно-оптичних центрів у випадку смектичних стекол або молекул у випадку композитів ЛПК-віологен), L – фактор локального поля, ϵ_0 – діелектрична стала, c – швидкість світла, n_0 – середній показник заломлення.

Розраховані з експериментальних даних величини нелінійно-оптичних параметрів $n_2, \chi^{(3)}$ та γ наведено в Таблиці 1. Усі дані подано в системі СГС, яка є загальноживаною в нелінійній оптиці; також наведено вираз для переходу від одиниць СГС до одиниць СІ.

Отримані для композитів ЛПК-віологен та смектичних стекол ЛПК високі значення нелінійної сприйнятливості та гіперполяризованості близькі за величинами до найкращих характеристик органічних барвників [10].

Таблиця 1

Нелінійно-оптичні параметри композитів ЛПК-віологен і смектичних стекол ЛПК

Зразок	n_2	$\chi^{(3)}$	γ
	см ² ·Вт ⁻¹	СГС	СГС
КЕД ²⁺ 2СІ ⁻ (димери)	1,8·10 ⁻¹⁰	0,8·10 ⁻⁸	1,2·10 ⁻²⁸
ГД ²⁺ 2Вг ⁻ (димери)	3·10 ⁻¹⁰	1,3·10 ⁻⁸	2,7·10 ⁻²⁸
ГД ²⁺ 2Вг ⁻ (катіон-радикал)	1,3·10 ⁻¹⁰	0,6·10 ⁻⁸	0,6·10 ⁻²⁸
СоС ₈	11,2·10 ⁻¹⁰	4,8·10 ⁻⁸	6,0·10 ⁻³⁰
СоС ₁₀	8,3·10 ⁻¹⁰	3,5·10 ⁻⁸	5,3·10 ⁻³⁰
СоС ₁₂	4,5·10 ⁻¹⁰	1,9·10 ⁻⁸	3,5·10 ⁻³⁰
Со,Li С ₈	4,6·10 ⁻¹⁰	1,9·10 ⁻⁸	3,5·10 ⁻³⁰
Со,K С ₈	5,3·10 ⁻¹⁰	2,2·10 ⁻⁸	4,2·10 ⁻³⁰
Со,Li,K С ₈	4,6·10 ⁻¹⁰	1,9·10 ⁻⁸	3,6·10 ⁻³⁰

$$\chi^{(3)}(СГС) = \frac{9}{4 \cdot \pi} \cdot 10^8 \chi^{(3)}(СІ)$$

Механізм нелінійно-оптичного запису

Відомо, що ефект нелінійної поляризації в полі інтенсивного лазерного випромінювання, коли величина поляризації нелінійно залежить від напруженості зовнішнього електричного поля, можуть проявляти органічні речовини, молекули яких містять делокалізовані π -електрони [10].

Запис дифракційних ґраток у зразках ЛПК-віологен відбувається у забарвленому шарі продуктів відновлення віологенів, що утворюється на катоді внаслідок дії електричного поля. До складу вихідних (невідновлених)

молекул віологенів входять два дипіридилієві кільця, на яких зосереджено слабо делокалізовані π -електрони. При цьому після зумовленого електричним полем відновлення молекул до катіон-радикалів і димерів степінь делокалізації їх π -електронів різко зростає. У той час як для вихідних зразків ЛІРК-віологен (прозорих) голографічний запис не спостерігали, зразки, що містили катіон-радикали або димери віологенів, демонстрували дифракційну ефективність, яка виявилася більшою в останньому випадку. Відповідно, значення кубічної нелінійної сприйнятливості ($\chi^{(3)}$) і гіперполяризованості (γ) також були вищими у випадку димерів (табл. 1).

У зразках ТІРК основними нелінійно-оптичними центрами є комплекси, утворені катіонами кобальту в оточенні атомів кисню карбоксильних груп алканонатних лігандів, в яких розміщуються делокалізовані π -електрони.

Для гомологічного ряду алканонатів кобальту величини нелінійної діелектричної сприйнятливості $\chi^{(3)}$ зростають зі зменшення довжини алкільного ланцюга, тобто зі збільшенням концентрації нелінійно-оптичних центрів. При цьому атоми кисню карбоксильних груп координують одночасно кілька сусідніх катіонів кобальту, що призводить до утворення координаційної сітки в межах катіон-аніонного прошарку. Оскільки в катіон-аніонному прошарку міститься велика кількість карбоксильних груп з делокалізованими π -електронами, то смектичні стекла здатні до колективної електронної поляризації, що і зумовлює появу посиленого нелінійно-оптичного відгуку середовища.

Ще одним важливим фактором, що сприяє збільшенню величини дифракційної ефективності та гіперполяризованості, є потрапляння довжини хвилі збуджуючого лазерного випромінювання ($\lambda = 539,8$ нм) у смугу поглинання записуючого середовища. Згідно зі спектральними даними для композитів ЛІРК-віологен (Рис.1), максимум поглинання димерів лежить поблизу $\lambda = 520-525$ нм, а для досліджених ТІРК кобальту максимуми поглинання лежать в області $\lambda \sim 530$ нм та $\lambda \sim 560$ нм (Рис.2). Отже, для зразків ЛІРК, що містять віологени в димерній формі, та ТІРК

алканонатів кобальту ефект резонансного підсилення відіграє значну роль.

Високі значення $\chi^{(3)}$ і γ , а також малий внесок теплових ґраток в нелінійні властивості вигідно відрізняють композити ЛІРК-віологен і смектичні стекла ТІРК алканонатів кобальту від інших середовищ. Зокрема, у порівнянні з такими традиційними анізотропними матеріалами, як нематичні рідкі кристали, у досліджуваних зразках був відсутній ефект переорієнтації молекул. Усі ці чинники роблять композити ЛІРК-віологен та смектичні стекла ТІРК алканонатів кобальту перспективними матеріалами для голографічного запису.

Висновки

Отримано запис динамічних дифракційних ґраток на поглинаючих зразках композитів ліотропний іонний рідкий кристал (ЛІРК) – віологен та смектичних стекел термотропних іонних рідких кристалів (ТІРК) й обраховано основні експериментальні характеристики запису, такі як дифракційна ефективність η та коефіцієнт нелінійної рефракції n_2 .

Оскільки молекули віологенів у композитах ЛІРК-віологен і молекули алканонатів у смектичних стеклах ТІРК містять делокалізовані π -електрони, запропоновано механізм запису дифракційних ґраток, пов'язаний з ефектом нелінійної поляризації в полі інтенсивного лазерного випромінювання.

Встановлено, що як у випадку композитів ЛІРК-віологен, так і у випадку смектичних стекел ТІРК збільшенню величини спостережуваної дифракційної ефективності сприяло потрапляння довжини хвилі збуджуючого лазерного випромінювання у смугу поглинання записуючого середовища.

Для композитів ЛІРК-віологен та смектичних стекел ТІРК оцінено значення нелінійної сприйнятливості ($\chi^{(3)} \sim 10^{-8}$ esu) та гіперполяризованості ($\gamma \sim 10^{-28}$ esu), які за порядком величини відповідають найкращим характеристикам органічних сполук за умови резонансного збудження.

Список використаних джерел

References

1. Polishchuk A. P. Metal-containing liquid-crystal phases / A. P. Polishchuk, T. V. Timofeeva. // Russian Chemical Reviews. – 1993. – №62. – P. 291–321.
2. Gridyakina A. V. Physical properties of liquid crystals in lead decanoate systems / A. V. Gridyakina, G. V. Klimusheva, A. P. Polishchuk. // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2005. – №79. – P. 71–75.
3. Bordyug A. B. Structure and intermolecular interactions in ionic liquid crystals doped with electrochromic viologen / A. B. Bordyug, G. V. Klimusheva, A. P. Polishchuk. // Russian Journal of Physical Chemistry. – 2005. – №79. – P. 66–70.
4. Polishchuk A. P. Products of quaternization of 4,4'-Bipyridine with halogenated carboxylic acids. synthesis, structure, and photoreduction in the crystalline state / I. Yu. Polishchuk, L. G. Grineva, A. P. Polishchuk // Russian Journal of General Chemistry. – 1998. – Vol. 68. – N.4. – P. 609–616.
5. Bordyuh A. B. Dynamic grating recording in lyotropic ionic smectics of metal alkanooates doped with electrochromic impurities / A. B. Bordyuh, Yu. A. Garbovskiy, S. A. Bugaychuk // Optical Materials. – 2009. – Vol. 31. – P. 1109–1114.
6. Gridyakina A. V. Tunable optical and nonlinear optical response of smectic glasses based on cobalt alkanooates / Yu. A. Garbovskiy, A. V. Gridyakina, G. V. Klimusheva // Liquid Crystals. – 2010. – Vol.37 – P. 1411 — 1418.
7. Волков С. В. Спектроскопія розплавлених солей / С. В. Волков, К. Б. Яцимирский. – К.: Наукова думка, 1977. – 223 с.
8. Crabb E. Concepts in Transition Metal Chemistry / E. Crabb, E. Moore, L. Smart. – London: Royal Society of Chemistry, 2010. – 140 p.
9. Bordyuh A. B. Fast nonlinear optical mechanisms in Bi-Layered cells composed by lyotropic ionic liquid crystals with dye and viologen films/ A. B. Bordyuh, Yu. A. Garbovskiy, S. A. Bugaychuk // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2009 – Vol. 508 – P. 296–308.
10. Sakai T. Third order nonlinear optical properties of retinal derivatives / T. Sakai, Y. Kawabe, H. Ikeda // Applied Physics Letters. – 1990. – V.56 – P. 411–413.

1. POLISHCHUK, A. & TIMOFEEVA, T. (1993) “Metal-containing liquid-crystal phases”. Russian Chemical Reviews. Vol. 62. p. 291–321.
2. GRIDYAKINA, A., KLIMUSHEVA, G. & POLISHCHUK, A. (2005) “Physical properties of liquid crystals in lead decanoate systems”. Russian Journal of Physical Chemistry. Vol. 79. p. 71–75.
3. BORDYUG, A., KLIMUSHEVA G. & POLISHCHUK., A. (2005) “Structure and intermolecular interactions in ionic liquid crystals doped with electrochromic viologen”. Russian Journal of Physical Chemistry. Vol. 79. p. 66–70.
4. POLISHCHUK, I., GRINEVA, L. & POLISHCHUK, A. (1998) “Products of quaternization of 4,4'-Bipyridine with halogenated carboxylic acids. synthesis, structure, and photoreduction in the crystalline state”. Russian Journal of General Chemistry. Vol. 68 N. 4. p. 609–616.
5. BORDYUH, A., GARBOVSKIY, YU. & BUGAYCHUK, S. (2009) “Dynamic grating recording in lyotropic ionic smectics of metal alkanooates doped with electrochromic impurities”. Optical Materials. Vol. 31. p. 1109–1114.
6. GARBOVSKIY, YU., GRIDYAKINA, A. & KLIMUSHEVA, G. (2010) “Tunable optical and nonlinear optical response of smectic glasses based on cobalt alkanooates”. Liquid Crystals. Vol. 37. p. 1411 — 1418.
7. VOLKOV, S. & JACIMIRSKIY, K. (1970) *Spectroscopy of molten salts*. Kiev: Naukova dumka.
8. CRABB, E., MOORE, E. & SMART, L. (2010) *Concepts in Transition Metal Chemistry*. London: Royal Society of Chemistry.
9. BORDYUH, A., GARBOVSKIY, YU. & S. BUGAYCHUK (2009) “Fast nonlinear optical mechanisms in Bi-Layered cells composed by lyotropic ionic liquid crystals with dye and viologen films”. Molecular Crystals and Liquid Crystals. Vol. 508. p. 296–308.
10. SAKAI, T., KAWABE, Y. & IKEDA, H. (1990) “Third order nonlinear optical properties of retinal derivatives”. Applied Physics Letters. Vol. 56. p. 411–413.

Надійшла до редколегії 04.03.18

УДК 530.145.1

Конончук Г.Л.¹, к.ф.-м.н., доц.

Особливості взаємодії фізичного вакууму та світлових хвиль

¹Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4а,
e-mail: lukichu@i.ua

G. L. Kononchuk¹, Phd.

Peculiarities of interaction of Physical vacuum and light waves

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkov ave., 4a,
e-mail: lukichu@i.ua

На основі усталених уявлень, достовірних фактів і явищ досліджується запропонована модель взаємодії електромагнітних хвиль з фізичним вакуумом. Показано, що з припущення про фізичний вакуум як про діелектричне середовище, випливає постулат про постійність швидкості світла в усіх інерційних системах відліку. Наведено пояснення часткового захоплення світла рухомих середовищем (ефект Фізо), ефекта гравітаційної лінзи, зміщення спектру електромагнітної хвилі в гравітаційному полі. Червоний зсув спектра галактик може мати альтернативне пояснення не пов'язане з їх розбіганням. Внаслідок цього пояснення відпадає необхідність використання ідеї темної енергії.

Ключові слова: світло, фізичний вакуум, віртуальні частинки, гравітаційна лінза, червоний зсув, темна енергія.

Based on established representations, reliable facts and phenomena, the proposed model of the interaction of electromagnetic waves with a physical vacuum is studied. It is shown that from the assumption of a physical vacuum as a dielectric medium, the postulate of the constancy of speed of light follows in all inertial reference systems. The explanation of the partial capture of light by a moving medium (the effect of Fizeau), the effect of a gravitational lens, displacement of the spectrum of an electromagnetic wave in a gravitational field is given. The redshift of the spectrum of galaxies may have an alternative explanation not related to their expansion. As a result of this explanation there is no need to use the idea of dark energy.

Key words: light, physical vacuum, virtual particles, gravitational lens, red shift, dark energy.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М.В.

Вступ

Ця робота спрямована на пояснення фізичної природи постулату Ейнштейна про постійність швидкості світла, парадоксу у визначенні енергії хвиль, взаємодії гравітації та світла, досліду Фізо, а також сучасних ефектів, таких як червоне зміщення, темна енергія, світлова та надсвітлова швидкість об'єктів на периферії видимого всесвіту. В цій роботі використовується та досліджується модель запропонована в [1].

Швидкість світла.

За сучасними уявленнями фізичний вакуум є сукупність, віртуальних, зокрема, електрон-позитронних пар. Оскільки це сукупність зарядів,

їх можна представити як діелектричне середовище. На зміну частинкам, що зникають, з'являються нові, і всередньому густина електричних зарядів обох знаків відмінна від 0. В кінцевому рахунку віртуальні частинки, як і діелектрик, не поглинають енергію хвилі, а лише затримують її фазу. Їх інертність зумовлює затримку фази хвилі і спричиняє появу такої характеристики, як швидкість хвилі в просторі. Перевипромінена віртуальними частинками в деякій площині 1 хвиля з'являється в іншій площині 2 на відстані Δx за час Δt з затримкою фази, яка зумовлена індивідуальним доплерівським зсувом, що обумовлений рухом частинок. Дійсно, частинки, що мають складову

швидкості v вздовж хвильового вектора, дають затримку фази $\varphi_D = \frac{2\pi}{\lambda} v \Delta t$. Розділимо всі частинки між площинами 1 та 2 на $2N$ груп за значенням проекції швидкості на напрямок руху хвилі. В кожній групі частинки мають приблизно однакове значення v_n . Виділимо дві групи частинок зі швидкостями v_n та $-v_n$. В площині 2 вони створюють збудження

$$\Delta E_2 = \frac{E_0}{2N} \exp(i(\omega t - kx)) \cdot (\exp(i\varphi_D) + \exp(-i\varphi_D)) = \frac{E_0}{N} \exp(i(\omega t - kx)) \cdot \cos(\varphi_D) \quad (1)$$

Загальне збудження утворює хвилю

$$E_2 = \lim_{N \rightarrow \infty} E_0 \exp(i(\omega t - kx)) \frac{1}{N} \cdot \sum_{n=-N}^N \cos\left(2\pi \frac{v_n}{\lambda} \Delta t\right) \quad (2)$$

Сума вкладів від груп частинок з усіма можливими швидкостями визначає хвилю в площині 2

$$E_2 = E_1 \exp(-ikx) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(v) dv \quad (3)$$

де $E_1 = E_0 \exp(i\omega t)$ – збудження в першій площині, $\delta(v)$ – функція Дірака. Інтеграл дорівнює 1 тільки при $v = 0$, це означає, що у перевипромінненні хвилі в площині 1 беруть участь лише частинки з нульовою проекцією швидкості на напрям поширення хвилі. Це збудження буде прийнято всіма частинками площини 2, але в подальшому у перевипромінюванні знову беруть участь тільки частинки з нульовою проекцією швидкості.

Це дуже важливий результат: в іншій (рухомій) системі відліку є своя група віртуальних квазінерухомих в цій системі частинок. Тобто, ця група частинок є індивідуальною для кожної системи відліку. Якщо для двох різних систем відліку (з відмінними швидкостями руху) в момент старту хвилі площини типу 1 просторово співпадають, то площини типу 2 очевидно будуть рознесені в просторі. Отже, поняття швидкості світла існує лише в певній системі відліку для спостерігача, який знаходиться в ній, і завжди є постійною. Примусове накладання двох площин типу 2 призводить до штучної деформації простору, що і відображено формулами Лоренца. Це є припустимо як інструмент вирішення завдань при математичному моделюванні, але не для інтерпретації дійсності.

Зі сказаного випливає, що в будь-якому експерименті вимірюється швидкість світла завжди і тільки у власній системі координат спостерігача. Вимірювання швидкості світла в заданій системі координат має сенс лише при нерухомих площинах 1-2 в тій же системі. Одне і те ж світло для спостерігачів з різних систем є індивідуальним явищем. Не існує, таким чином, єдиного світла для всіх спостерігачів, що проявляється, зокрема, і в тому, що і один і той же предмет виглядає по-різному при спостереженні з різних рухомих платформ.

Дослід Фізо

Ефект Доплера проявляється по-різному в залежності від поведінки трьох учасників: джерело, детектор випромінювання та середовище між ними. В досліді Фізо середовище рухається зі швидкістю v_0 , тому відповідна хвиля реєструється у вигляді

$$E_2 = E_0 \exp(i(\omega t - kx - \varphi_D)) \quad (4)$$

де зміщення фази $\varphi_D = \frac{2\pi}{\lambda} v_0 \Delta t = \frac{2\pi v_0 \mu l}{\lambda c}$, Δt – час взаємодії світла з рухомих середовищем товщиною l , μ – показник заломлення, c – швидкість світла у вакуумі.

Якщо хвиля одночасно перевипромінюється двома системами частинок – віртуальними (концентрація N_1) і реальними рухомими (концентрація N_2), які знаходяться в одному і тому самому об'ємі, то детектор реєструє сумарну хвилю: $E = E_1 \exp(i(\omega t - kx)) + E_2 \exp(i(\omega t - kx - \varphi_D))$, амплітуди яких E_1 та E_2 пропорційні концентраціям частинок. Ця сума дорівнює

$$E = E_3 \exp(i(\omega t - kx - \alpha)), \quad (5)$$

$$\text{де } E_3 = E_1 \cdot \frac{\sin(\varphi_D)}{\sin(\varphi_D - \alpha)}, \quad (6)$$

$$\alpha = \arctg \frac{\sin(\varphi_D)}{\frac{N_1}{N_2} + \cos(\varphi_D)}. \quad (7)$$

Це виглядає таким чином, ніби світлова хвиля захоплюється рухомими частинками не повністю, а з коефіцієнтом $\frac{\alpha}{\varphi_D}$. Фізо [2] експериментально знайшов цю затримку, яку назвав «коефіцієнтом захоплення рідиною світоносного ефіру», і яка виявилася залежною від показника заломлення

рідини, що рухалась ($1-\mu^2$). Отримані формули (5-7) якісно співпадають з результатами досліду Фізо, а незначна кількісна різниця пов'язана з відмінностями моделей (речовини, що рухається) – у досліді Фізо це була рідина.

Вплив гравітації на хвилю

В гравітаційному полі віртуальні частинки зазнають прискорення протягом короткого часу життя. Результатом цього впливу є зміна частоти перевипроміненого світла. Частота змінюється на

$$\Delta\omega_D = \frac{d\varphi_D}{dt} \Delta t = \frac{2\pi v}{c} \frac{dv}{dt} l \quad (8)$$

Знак зміни залежить від напрямку руху.

В 1960 році Паунд Р. В. [3] для $l = 22.5$ м отримав за допомогою ефекту Месбауера експериментально відносну зміну частоти $\frac{\Delta\omega_D}{\omega} = 2,5 \cdot 10^{-15}$, що точно співпадає з розрахунком за формулою (8). Це підтверджує гіпотезу, що взаємодія світла і гравітації фізично відбувається за участі віртуальних частинок, саме через те, що вони є одночасно носіями і заряду, і маси.

Відомо також, що промінь світла відхиляється в напрямку джерела гравітації, якщо він проходить повз масивний об'єкт. В нашій моделі це пояснюється наступним чином. Віртуальні частинки протягом короткого часу існування переважно рухаються в напрямку центру гравітації. Останній виступає як центр тимчасової конденсації віртуальних частинок. Біля масивного об'єкта спостерігається підвищена густина фізичного вакууму, що і спричиняє градієнт показника заломлення і, як наслідок, ефект лінзи. Таким чином, при поясненні взаємодії світла і гравітації нема потреби застосовувати ідеї викривлення простору і деформації часу. Звичайно, ця якісна модель заслуговує на математичне обґрунтування; вона, на наш погляд, не містить протиріч.

Енергія хвилі

Попередня формула (8) має універсальний характер та не залежить від природи прискорення $\frac{dv}{dt}$ частинок. Для випадку прискорення електрона $\frac{dv}{dt}$ в електричному полі E формула (8) дає змогу логічно пояснити ще один стандарт і набуває вигляду:

$$\frac{\Delta\omega_D}{\omega} = \frac{eEl}{mc^2} = \frac{eU}{mc^2} \quad (9)$$

U – прискорююча різниця потенціалів. Праву частину рівності можна трактувати як питому зміну енергії частинки, що прискорюється в електричному полі. Отже, ліва – є питома зміна енергії хвилі. Тобто, енергія хвилі однозначно детермінується через частоту, що свого часу постулювали Планк [4] і Ейнштейн [5]. Це може означати, що світлова хвиля у своїй основі пов'язана не з реальними частинками, а з віртуальними, бо для реальних частинок енергія однозначно пов'язана з амплітудою.

Червоний зсув

Червоний зсув спектру далеких галактик існує як незаперечний факт, проте пояснити його можна менш драматичними припущеннями. Оптичний шлях L визначається як добуток геометричного шляху l і показника заломлення μ :

$$L = \mu l \quad (10)$$

В такому разі швидкість v проходження дистанції

$$v = \frac{dL}{dt} = \frac{d\mu}{dt} l + \mu \frac{dl}{dt} \quad (11)$$

навіть при незмінному, $l = \text{const}$, маємо зміну відстані зі швидкістю:

$$v = \frac{d\mu}{dt} l. \quad (12)$$

Наприклад, на периферії видимого Всесвіту, при $l = 13,8$ млрд світлових років, і $v = c$ маємо $\frac{d\mu}{dt} = 2,3 \cdot 10^{-18} \text{с}^{-1}$, що практично і спостерігається: це відповідає постійній Хаббла $N = 70 \text{ км} \cdot \text{с}^{-1} \cdot \text{Мпк}$. Чому змінюється показник заломлення вакууму – це більш спокійне питання, ніж звідки береться темна енергія для забезпечення таких швидкостей розльоту.

Світлова та надсвітлова швидкість об'єктів

Зауважимо, якщо у Всесвіті зміна $\frac{d\mu}{dt}$ однакова, то довільна точка простору виглядає як центр розбігання галактик. Зокрема з астрономічних спостережень випливає, що всі галактики розбігаються від сонячної системи. Але це просто означає, що в будь-якому напрямку від сонця $\frac{d\mu}{dt}$ має однакове значення. Якщо точку спостереження перемістити на 40-50 млрд

світлових років, знов спостерігатимемо Всесвіт у межах сфери радіусом 14 млрд світлових років, причому розбігання на периферії сфери рівне швидкості світла. Не виключено, що $\frac{d\mu}{dt}$ не є постійна величина, а може змінюватися з характерною постійною часу порядку 6-10 млрд років. Очевидно, це проявиться у непостійності константи Хаббла. На даний момент є дані, що підтверджують цей факт. Тоді ми змушені визнати, що немає необхідності у концепції розльоту галактик і тим більше, темної енергії.

Можливі експерименти

Ми прогнозуємо, що деякі з розглянутих явищ можна спостерігати в умовах лабораторії на реальних частинках. Відтворити хаотичний рух реальних зарядів можна створивши хмаринку термо- або фотоелектронів над металевою поверхнею, а запізнення фази світлової хвилі, що пробігає над поверхнею, спостерігати методами інтерферометрії. Також можна відтворити експеримент, аналогічний досліду Фізо. Необхідною умовою для цього є обов'язковий рівномірний рух електронів у вакуумі. Більше інформації можна отримати із взаємодії світлового променя з електронами в режимі прискореного руху. Згідно формули (5) при різниці потенціалів 5 кВ можна очікувати

зміщення частоти на 1%, що у видимій області складає кілька нанометрів. З іншого боку, у електрона з'являється додатковий канал втрати енергії, пов'язаний із зміною частоти, що проявляється як зміна внутрішнього опору газорозрядного проміжку (газ в розрядному проміжку потрібен для зменшення довжини вільного пробігу електронів та збільшення їх концентрації). Кореляція між вказаними явищами може дати цінну інформацію про конкретні параметри взаємодії світла і електричних зарядів.

Висновки

Світло є фактично посередником між віртуальними частинками і реальними. Тому його властивості – дуалізм хвиля-частинка, обмеженість швидкості світла та її незмінність у різних системах відліку, спосіб вимірювання швидкості хвилі, взаємодія з гравітацією – незвичні для суто реального світу. Постулати про швидкість світла, енергію фотона, власну енергію масивної частинки можна отримати як наслідок з класичних фізичних законів. Світло є інструментом для вивчення віртуальних частинок. Дослідження цієї взаємодії відкриває перспективу для альтернативного шляху пізнання природи походження і розвитку Всесвіту.

Список використаних джерел

1. Конончук Г. Л., Терентьева Ю. Г. Про швидкість світла – ще раз/ Г. Л. Конончук, Ю. Г. Терентьева // Наукові записки НАУКМА Серія фізико-математичні науки. – 2009. – том 87. – С.36-38.
2. Fizeau, H. (1851). "Sur les hypothèses relatives à l'éther lumineux". *Comptes Rendus*. **33**: 349–355.
3. Pound, R. V.; Rebka Jr. G. A. (1959). "Gravitational Red-Shift in Nuclear Resonance". *Physical Review Letters*. **3**(9): 439–441.
4. Planck M. (1901) "On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum". *Annalen der Physik*. **4**: 553 – 559
5. Einstein A. (1905). "Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt". *Annalen der Physik*. **17** (6): 132–148

References

1. KONONCHUK G., TERYTYEVA YU. (2009) Once again – about velocity of light *Scientific papers of NaUKMA Phys.-math. Series*. **87**. p.36-38.
2. FIZEAU, H. (1851) Sur les hypothèses relatives à l'éther lumineux. *Comptes Rendus*. **33**. p.349–355.
3. POUND, R. V.; REBKA Jr. G. A. (1959). Gravitational Red-Shift in Nuclear Resonance. *Physical Review Letters*. **3**(9). p.439–441.
4. PLANCK, M. (1901) On the Law of Distribution of Energy in the Normal Spectrum. *Annalen der Physik*. **4**. p.553–559.
5. EINSTEIN, A. (1905). Über einen die Erzeugung und Verwandlung des Lichtes betreffenden heuristischen Gesichtspunkt. *Annalen der Physik*. **17** (6). p.132–148.

Надійшла до редколегії 15.06.18

УДК 535.131, 539.219.1, 621.315.592

Макаренко О. В.¹, к.ф.-м.н., доц.,
Завалістий О. І.², студ.,
Ямпольський А. Л.³, асп.,
Поперенко Л. В.⁴, д.ф.-м.н., проф.

O. V. Makarenko¹, PhD.,
O. I. Zavalisty², stud.,
A. L. Yampolskiy³, PhD stud.,
L. V. Poperenko⁴, Dr. Sci., Prof.

Особливості змін оптичного відгуку в межах поверхневого оксидного шару в Si та GaAs

Features of changes in optical response within the surface oxide layer in Si and GaAs

^{1,2,3,4}Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13
e-mail: ¹almakar@univ.kiev.ua

^{1,2,3,4}Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13
e-mail: ¹almakar@univ.kiev.ua

Проведено кутові еліпсометричні дослідження природного оксидного шару на пластинках кремнію та арсеніду галію при довжині хвилі $\lambda = 625$ нм. Використано теоретичний підхід, який полягає у розбитті приповерхневої області досліджуваного середовища на 500 надтонких шарів, пов'язаних між собою функцією діелектричної проникності, і визначенні еліпсометричних параметрів середовища шляхом застосування матричних методів розрахунку амплітуд і фаз відбитих від такої системи хвиль у двох поляризаціях. Профіль оптичного відгуку за глибиною визначається за допомогою методу диференціальної еволюції шляхом варіювання оптичних сталей згідно з обраною теоретичною моделлю до досягнення мінімального відхилення між розрахованими та вимірними еліпсометричними параметрами. Проаналізовано профілі оптичного відгуку, що відповідають моделям напівнескінченного середовища, однорідного шару, а також лінійній та експоненціальній зміні оптичного відгуку за глибиною.

Ключові слова: еліпсометрія, багатошарова модель, оксидний шар, кремній, арсенід галію.

In this paper, the angular ellipsometric studies of natural oxidized surface layer on silicon and gallium arsenide are carried out. The mean wavelength of probe radiation beam was $\lambda = 625$ nm, with FWHM = 10 nm. Angular dependencies of ellipsometric parameters ψ and Δ (azimuth of restored linear polarization and phase shift between p- and s- components of reflected radiation) were recorded. The combined approach for their analysis, which consists in sectioning the investigated medium near-surface area into 500 ultrathin layers interconnected by the dielectric permittivity function and determining the ellipsometric parameters of the medium by applying matrix methods for calculating the amplitudes and phases of the reflected waves from such a system in two polarizations, was used. The depth of the optical response profile was determined by the method of differential evolution by varying optical constants in accordance with the chosen theoretical model to achieve a minimum deviation (MSE, Mean Squared Error) between the calculated and measured ellipsometric parameters. Optical response profiles corresponding to the models of half-infinite medium, a homogeneous layer, as well as the linear and exponential profiles are analyzed.

Key words: ellipsometry, multilayer model, oxide layer, silicon, gallium arsenide.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макарець М. В.

Вступ

Кремній та арсенід галію є матеріалами, що мають величезне значення в мікроелектроніці. Відомо [1-3], що при контакті з повітрям поверхня цих напівпровідників поступово окислюється. Це може бути як незначально, так і

корисною перевагою у різних технологічних процесах. Тому важливо знати механізм формування оксидного шару та його структуру.

Структура SiO₂-Si є однією з найбільш вивчених. Поблизу межі оксидного шару локалізуються дефекти ґратки, що можуть бути пастками для носіїв заряду та обмежувати

надійність кремнієвих пристроїв [4]. Азотування оксидного шару дозволяє позбутися кремній-кремнієвих зв'язків, чим можна вирішити проблему накопичення заряду в ньому.

Стосовно арсеніду галію, перебіг процесу окислення тривалий час не був остаточно з'ясований. Тепер відомо, що оксидний шар є аморфним [5] і складається переважно з термодинамічно стійкої фази Ga_2O_3 та надлишкового інтерфейсного шару Ga [6].

Тому *метою даної роботи стало з'ясування характеру змін оптичних сталих за глибиною у поверхневому оксидованому шарі пластинок Si та GaAs.*

Об'єкти дослідження та експеримент

Дослідженню підлягали зразки таких напівпровідникових матеріалів як Si і GaAs у вигляді пластин діаметром 75 мм, на яких присутній природний оксидований шар (рис. 1). Набір зразків включає: 1) монокристалічний кремній, 2) монокристалічний кремній, бомбардований іонами азоту, шар залягання яких знаходиться на глибині 63-77 мкм, 3) монокристалічний GaAs, 4) шар GaAs товщиною 3 мкм, осаджений на монокристалічну кремнієву підкладку.

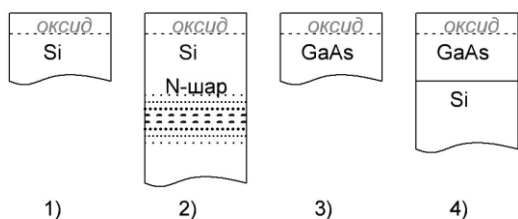


Рис. 1. Схема морфологічної будови зразків Si та GaAs

Проведено кутові еліпсометричні вимірювання азимута відновленої лінійної поляризації ψ та зсуву фаз Δ між р- та s-компонентами відбитого світла за допомогою автоматизованої гоніополяриметричної установки, описаної в роботі [7]. Дана установка функціонувала в режимі еліпсометра з аналізатором, що обертається. Довжина хвилі джерела випромінювання складала $\lambda = 625$ нм, а спектральна напівширина $\Delta\lambda = 10$ нм. Вимірювання проводились при кутах падіння $\theta = 60 \dots 80^\circ$ з кроком 1° .

Методика обробки експериментальних даних

Обробка отриманих результатів полягала у співставленні експериментально вимірюваних залежностей $tg \psi(\theta)$ й $cos \Delta(\theta)$ з відповідними розрахованими залежностями. При цьому параметри, що входять до теоретичної моделі, підбираються до досягнення мінімального взаємного відхилення між певною парою кривих. Це відхилення визначається функцією нев'язки MSE (Mean Squared Error):

$$MSE = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \left[\left(\cos(\Delta_j)^{theor} - \cos(\Delta_j)^{exp} \right)^2 + \left(tg(\psi_j)^{theor} - tg(\psi_j)^{exp} \right)^2 \right], \quad (1)$$

де M – кількість експериментальних точок на графіках кутових залежностей $tg \psi(\theta)$ і $cos \Delta(\theta)$.

Розрахунок теоретичних залежностей еліпсометричних параметрів ґрунтується на уявному розбитті поверхневого шару зразка на послідовність $k = 500$ надтонких шарів з індивідуальними оптичними параметрами (комплексний показник заломлення $N_j = n_j - ik_j$, діелектрична проникність ϵ_j). До цієї послідовності застосовують матричний метод розрахунку поширення світла у багатошарових системах, який детально описано в роботі [8]. Проводять розрахунок відбитої від багатошарової структури хвилі для випадків р- та s-поляризації. За відповідними амплітудами та фазами одержують шукані параметри ψ та Δ , що підлягають подальшому порівнянню з експериментально вимірюваними такими параметрами.

Для коректного розв'язання оберненої задачі еліпсометрії параметри усіх цих 500 шарів необхідно пов'язати єдиною функцією оптичного профілю. Такою функцією обрано діелектричну проникність, записану в загальному вигляді як

$$\epsilon(z) = \epsilon_1 + (\epsilon_0 - \epsilon_1) f_m(z/d), \quad (2)$$

де $f_m(z/d)$ задає вигляд її профілю за глибиною. Так, $f_m(z/d) = 0$ відповідає напівнескінченному середовищу; $f_m(z/d) = 1$ при $0 < z < d$ – одношаровій моделі; $f_m(z/d) = 1 - z/d$ – лінійному профілю; $f_m(z/d) = exp(-z/d)$ –

експоненційному профілю. Тоді показник заломлення знаходимо як $n = \sqrt{\varepsilon}$.

Пошук мінімуму функції MSE є нетривіальною задачею через ускладнений характер цієї функції. Дану процедуру реалізовано за допомогою методу диференційної еволюції [9]. Цей метод використовує випадкові числа для формування окремих поколінь певних випадкових розв'язків. Кожні наступні покоління генеруються комбінуванням розв'язків з попередніх поколінь, які найкраще задовольняють вимогу мінімізації цільової функції. Метод є надійним і відносно простим у реалізації, має невелику кількість заданих параметрів і дозволяє знаходити глобальні мінімуми складних функцій.

Результати та їх обговорення

На початковому етапі моделювання досліджуваних об'єктів розглянуто в наближенні однорідного напівнескінченного середовища. Знайдені оптичні параметри n і k наведено в табл. 1.

Таблиця 1.

Одержані в наближенні напівнескінченного середовища оптичні параметри n і k зразків

Зразок	n	k	MSE
1) Si	3,827	0,334	7,86e-6
2) Si : N	3,845	0,257	5,14e-6
3) GaAs	3,735	0,529	3,73e-6
4) GaAs / Si	3,770	0,449	7,93e-6

Відносно низьке значення MSE (табл. 1) свідчить про добре узгодження експериментальних і розрахованих кривих $tg(\psi)$ й $cos(\Delta)$. Однак, спостерігається значне відхилення одержаних оптичних параметрів порівняно з літературними даними ($n = 3,885$, $k = 0,017$ для кремнію [10] та $n = 3,865$, $k = 0,195$ для арсеніду галію [11] при $\lambda = 0,625$ мкм). Це цілком зрозуміло, адже модель ефективного середовища не враховує реальну структуру зразка.

Розглянемо наступну модель, що передбачає наявність на поверхні зразка однорідного оксидного шару. Для кремнію це SiO_2 ($n = 1,457$), а для арсеніду галію – Ga_2O_3 ($n = 1,425$) (при $\lambda = 0,625$ мкм). Єдиний параметр для варіації при цьому – товщина шару, межі якого задавали від 0

до 20 нм. Результати розрахунків представлені в Табл. 2.

Таблиця 2.

Товщини d оксиду на поверхні зразків, одержані в наближенні одношарової моделі з відомим складом

Зразок	d , нм	MSE
1) Si	4,67	8,81e-4
2) Si : N	3,57	7,16e-4
3) GaAs	5,58	1,22e-3
4) GaAs / Si	4,13	9,99e-4

Однак зазначимо, що навіть при підстановці значень показника заломлення оксидного шару, відмінних від величин, притаманних SiO_2 , алгоритм все одно надає таку його товщину, при якій MSE набуває достатньо малих значень. Тому надалі виходили з припущення, що тип оксиду не відомий, і підбирали вже його показник заломлення n . Одержали результати представлені в табл. 3.

Таблиця 3.

Товщини d та показники заломлення n оксидного шару, одержані в наближенні одношарової моделі з невідомим складом

Зразок	n	d , нм	MSE
1) Si	2,964	5,50	7,48e-6
2) Si : N	3,178	5,10	5,03e-6
3) GaAs	2,782	5,33	3,45e-6
4) GaAs / Si	2,936	7,53	7,43e-6

Видно, що MSE зменшується на 2 порядки і стає співставним із результатом моделювання в наближенні ефективного середовища. При цьому отримані товщини повністю відповідають типовим значенням товщини оксидного шару на поверхні напівпровідників [1, 3]. В той же час показники заломлення за своїми значеннями далекі від тих величин, що притаманні оксидам. Це може бути пов'язано з неоднорідністю структури поверхневого шару.

Відомо [4], що оксидний шар на поверхні напівпровідника часто має неоднорідну структуру. Тому для моделювання було застосовано наступні профілі діелектричної проникності за глибиною z : 1) лінійний по z як найпростіший; 2) експоненційний в залежності від z . Лінійний профіль є добрим наближенням для слабких по z залежностей, які можна

розкласти в ряд і обмежитись лише першими двома членами. Експоненційний же узятю з припущення, що неоднорідність шару може мати дифузійне походження.

Як з'ясувалось, для кремнієвих зразків у процесі мінімізації MSE початкова та кінцева точки лінійного профілю діелектричної проникності сходяться одна до одної, і модель наближається до такої, що має місце у випадку однорідного шару, вже розглянутого вище. Тому було вирішено накласти додаткову умову для зазначеної моделі: початкова точка лінійного профілю відповідає значенню n_0 показника заломлення для SiO_2 . Одержані результати розрахунку подано в табл. 4

Таблиця 4.

Початкове (n_0) та кінцеве (n_1) значення показника заломлення оксидованого шару SiO_2 і товщина шару d , одержані в наближенні лінійного профілю його діелектричної проникності

Зразок	n_0	n_1	d , нм	MSE
1) Si	1,457	4,040	6,63	2,37e-4
2) Si / N	1,457	4,076	5,19	3,04e-4

В припущенні, що бомбардування іонами азоту не змінює товщину шару SiO_2 на кремнії, бо глибина їх залягання складає 63-77 мкм і перевищує товщину скін-шару у видимій області, уточнено величину показника заломлення кремнієвої підкладки шляхом фіксації товщини оксидного шару значенням, рівним тій величині, що була одержана для небомбардованого зразка. Завдяки варіюванню параметрів підкладки отримано величини $n = 3,869$, $k = 0$ при $\text{MSE} = 9,25e-4$. Ці результати були використані для повторного моделювання з використанням лінійного профілю з фіксованою початковою точкою значенням $n_0 = 1,457$. Одержано параметри, зазначені в табл. 5.

Таблиця 5.

Початкове (n_0) та кінцеве (n_1) значення показника заломлення оксидованого шару SiO_2 і товщина шару d , одержані в наближенні лінійного профілю його діелектричної проникності з уточненими параметрами підкладки

Зразок	n_0	n_1	d , нм	MSE
1) Si	1,457	4,231	6,15	4,99e-6
2) Si / N	1,457	3,132	3,53	4,99e-6

При порівнянні результатів табл. 4 і табл. 5 помітно, що кінцевий показник заломлення n_1

дещо змінився (як в сторону збільшення, так і зменшення для різних зразків), товщини d зменшились, а MSE понизилась на 2 порядки.

Таблиця 6.

Товщини d , одержані в наближенні експоненційного профілю діелектричної проникності

Зразок	d , нм	MSE
2) Si : N	1,93	7,46e-4
3) GaAs	7,13	1,16e-4
4) GaAs / Si	6,78	1,22e-3

Нарешті, застосування експоненційного профілю діелектричної проникності зразків за глибиною z при варіації товщини d у межах від 0 до 20 нм призвело до збіжності експериментальних і розрахованих даних, порівняної зі збіжністю, що досягалася в результаті застосування одношарової однорідної моделі з відомим складом та лінійного профілю.

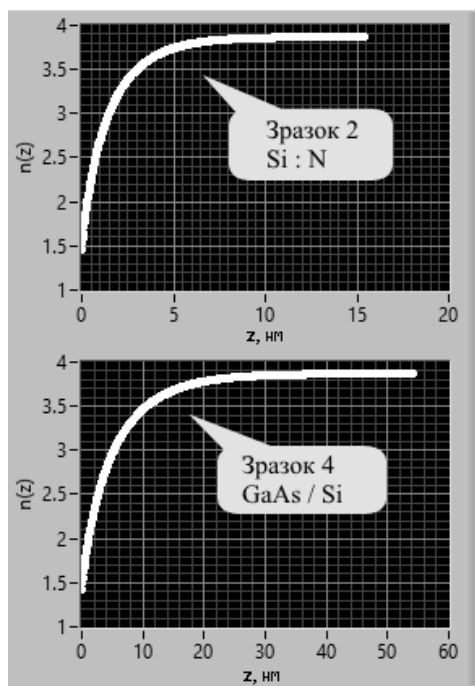


Рис. 2. Профілі показника заломлення для зразків 2) Si : N та 4) GaAs / Si (відповідно (а) та (б)), одержані за моделлю експоненційного профілю діелектричної проникності.

Початкові і кінцеві значення використаної експоненти були зафіксовані згідно з літературними даними, причому були враховані показники поглинання для підкладки, а для самої плівки її поглинанням нехтували.

Результати розрахунку представлені в табл. 6. Підкреслимо, що у випадку експоненційного профілю за товщину оксидного шару приймали таку глибину z , при якій показник експоненти набуває значення -1 (співвідношення 2).

У відповідності до експоненційного профілю діелектричної проникності на рис. 2 представлено також залежності показника заломлення за глибиною z , нм.

Не дивлячись на те, що межі для варіації параметра товщини d були досить широкі, результати моделювання все ж надають певні значення товщини, що складають близько кількох нанометрів. Це добре узгоджується з товщинами відповідних оксидних шарів, відомими з літератури [1, 3].

Висновки

Модель напівнескінченного середовища дає добре узгодження експериментальних та розрахованих залежностей еліпсометричних параметрів $tg(\psi)$ й $cos(\Delta)$ для напівпровідників Si та GaAs, що мають природний оксидний шар

на поверхні. Однак така модель не враховує реальну морфологічну структуру поверхневого шару, а натомість представляє його усереднено, у вигляді ефективного середовища.

Одношарова модель та модель лінійної залежності діелектричної проникності за глибиною z краще описують в межах скін-шару оптичний відгук поверхневої структури таких зразків за умови певного уточнення значення показника заломлення оксидного шару чи самої підкладки.

Модель експоненційного профілю діелектричної проникності за глибиною z , як і інші розглянуті моделі, надає товщини оксидного шару, які добре узгоджуються з типовим їх значенням, відомим з літератури, однак, згідно з вибраним нами критерієм мінімізації функції нев'язки MSE, дана модель є менш прийнятною щодо опису змін оптичного відгуку в межах поверхневого перехідного шару з оксидами зазначених напівпровідникових матеріалів.

References

Список використаної літератури

1. Lukeš, F. Oxidation of Si and GaAs in air at room temperature. / F. Lukeš // *Surface Science*, 30 (1), 1972, 91-100 pp. doi:10.1016/0039-6028(72)90025-8
2. Торхов Н. А. Формирование структуры собственного оксида на поверхности N-GaAs при естественном окислении на воздухе. / Н. А. Торхов // *Физика и техника полупроводников*. – 2003. – т. 37, вып. 10. – с. 1205-1213.
3. Morita M. Growth of native oxide on a silicon surface. / M. Morita, T. Ohmi, E. Hasegawa, M. Kawakami, and M. Ohwada // *Journal of Applied Physics*. – 68(3). – 1272-1281 pp.
4. Гриценко В. А. Структура границ раздела кремний/оксид и нитрид/оксид / В. А. Гриценко // *Успехи физики полупроводников*. – 2009. – т. 179. – №9. – с. 921
5. Watanabe, K. Oxide layers on GaAs prepared by thermal, anodic and plasma oxidation: In-depth profiles and annealing effects. / K. Watanabe, M. Hashiba, Y. Hirohata, M. Nishino, and T. Yamashina // *Thin Solid Films*. – 1979. – 56(1-2). – 63-73 pp.
1. LUKÉŠ, F. (1972). Oxidation of Si and GaAs in air at room temperature. *Surface Science*. 30(1), 91–100 pp. doi: 10.1016/0039-6028(72)90025-8.
2. TORKHOV, N. A. (2003). Formation of a native-oxide structure on the surface of n-GaAs under natural oxidation in air. *Semiconductors*. 37(10), 1205–1213 pp. doi: 10.1134/1.1619513.
3. MORITA, M., OHMI, T., HASEGAWA, E., KAWAKAMI, M., and OHWADA, M. (1990). Growth of native oxide on a silicon surface. *Journal of Applied Physics*. 68(3), 1272–1281 pp. doi: 10.1063/1.347181.
4. GRITSENKO, V. A. (2009). Structure of silicon/oxide and nitride/oxide interfaces. *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*. 179(9), p. 921. doi: 10.3367/ufnr.0179.200909a.0921.
5. WATANABE, K., HASHIBA, M., HIROHATA, Y., NISHINO, M., and YAMASHINA, T. (1979). Oxide layers on GaAs prepared by thermal, anodic and plasma oxidation: In-depth profiles and annealing effects. *Thin Solid Films*. 56(1-2), 63–73 pp. doi: 10.1016/0040-6090(79)90052-x.

6. Gérard, I. Local oxide growth on the n-GaAs surface studied by small area XPS. / I. Gérard, C. Debiemme-Chouvy, J. Vigneron, F. Bellenger, S. Kostelitz, and A. Etcheberry // *Surface Science*. – 1999. – 433-435, 131–135 pp.
7. Yampolskiy A. L. Ellipsometry of hybrid noble metal-dielectric nanostructures. / A. L. Yampolskiy, O. V. Makarenko, L. V. Poperenko, and V. O. Lysiuk // *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*. – 2018. – 21, №4, p. 412.
8. Berning P. H. Theory and calculations of optical thin films. / P. H. Berning // *Physics of Thin Films* / ed. by G. Hass. – 1963. – San Diego: Academic. – p. 69.
9. Storn R. Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. / R. Storn, and K. Price // *J. Global Optim.* – 1997. – 11. – №4. – 341-359 pp.
10. Jellison G. E. Optical functions of silicon determined by two-channel polarization modulation ellipsometry. / G. E. Jellison // *Optical Materials*. – 1992. – 1(1). – 41–47 pp.
11. Jellison G. E. Optical functions of GaAs, GaP, and Ge determined by two-channel polarization modulation ellipsometry. / G. E. Jellison // *Optical Materials*. – 1992. – 1(3). – 151–160 pp.
6. GÉRARD, I., DEBIEMME-Chouvy, C., VIGNERON, J., BELLENGER, F., KOSTELITZ, S., & ETCHEBERRY, A. (1999). Local oxide growth on the n-GaAs surface studied by small area XPS. *Surface Science*. 433-435, 131–135. doi: 10.1016/s0039-6028(99)00071-0.
7. YAMPOLSKIY, A. L., MAKARENKO, O. V., POPERENKO, L. V., and LYSIUK, V. O. (2018) Ellipsometry of hybrid noble metal-dielectric nanostructures. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics*. 21, №4, p. 412.
8. BERNING, P. H. Theory and calculations of optical thin films. In: *Physics of Thin Films*, Vol. 1, ed. by G. Hass (Academic, San Diego, 1963), p. 69.
9. STORN, R., and PRICE, K. (1997) Differential evolution – a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *J. Global Optim.* 11, №4, 341-359 p.
10. JELLISON, G. E. (1992). Optical functions of silicon determined by two-channel polarization modulation ellipsometry. *Optical Materials*. 1(1), 41–47 pp. doi: 10.1016/0925-3467(92)90015-f.
11. JELLISON, G. E. (1992). Optical functions of GaAs, GaP, and Ge determined by two-channel polarization modulation ellipsometry. *Optical Materials*. 1(3), 151–160 pp. doi: 10.1016/0925-3467(92)90022-f.

Надійшла до редколегії 20.06.2018

УДК 539.21

Ніколаєнко Т. Ю.¹, к.ф.-м.н.

**Визначення дипольних моментів
ковалентних зв'язків за допомогою
CLPO-аналізу**

¹Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13,
e-mail: ¹tim_mail@ukr.net

T. Yu. Nikolaienko¹, Ph.D.

**Determination of the covalent bond dipole
moments with CLPO analysis**

¹Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: ¹tim_mail@ukr.net

На основі методики локалізації орбіталей, яка забезпечує якнайточнішу апроксимацію зведеної одноелектронної матриці густини електронної підсистеми молекули, запропоновано модель розділення дипольного моменту молекули на адитивні складові, визначені в CLPO-базисі. З використанням запропонованої моделі визначено внески до загального дипольного моменту молекули від її ковалентних зв'язків та неподілених електронних пар атомів. Використовуючи набори з 11410 різних електронейтральних 12-атомних молекул та з 613 конформерів молекули 2'-дезокситидин-5'-монофосфату, показано, що похибка апроксимації модуля загального дипольного моменту молекули сумою локалізованих складових, визначених в рамках запропонованої моделі, складає близько 10%, а характерні значення кута між вектором дипольного моменту та його апроксимованим значенням складають 5,5°.

Ключові слова: локалізовані орбіталі, CLPO-аналіз, дипольний момент, конформація.

Basing on the orbitals localization method which provides the most accurate (in a Frobenius norm sense) approximation for the reduced one-particle density matrix of the molecule, the model is proposed for partitioning the dipole moment of the molecule into additive contributions, defined in CLPO basis. By augmenting the proposed model with the Ruedenberg scheme for partitioning the nuclear contribution to the dipole moment, the contributions to the dipole moment associated with particular covalent bonds and lone pairs of the atoms were determined. Using the datasets composed of 11410 12-atomic molecules with zero total charge and the set of 613 conformations of electroneutral 2'-deoxycytidine-5'-monophosphate molecule, it has been found that the error in approximating the total dipole moment of the molecule by the sum of localized contributions, determined in the framework of the proposed model, is close to 10%, and is noticeably below the similar error when only the NPA charges are used to compute the approximate dipole moment. The typical angle between the true dipole moment vector and the dipole moment vector approximated with the proposed model is 5.5 deg.

Key Words: localized orbitals, CLPO-analysis, dipole moment, conformation.

Статтю представив акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Використання локалізованих орбіталей є одним зі способів інтерпретації електронної структури молекул та їхніх комплексів в рамках уявлень про будову молекул як про сукупність атомів, з'єднаних ковалентними хімічними зв'язками. В основі такої інтерпретації лежить співвіднесення кожної з локалізованих орбіталей з певним атомом або ковалентним зв'язком, утвореним двома атомами. Завдяки цьому, при використанні локалізованих орбіталей $\varphi_i^{loc}(\vec{r})$ як базисних функцій для представлення зведеної одноелектронної матриці густини $\gamma(\vec{r}, \vec{r}')$, яка за

означенням пов'язана з N -частинковою хвильовою функцією $\Psi(\vec{r}, \vec{r}', \dots, \vec{r}_N)$ електронної підсистеми молекули як

$$\gamma(\vec{r}, \vec{r}') = N \cdot \int \Psi^*(\vec{r}, \dots, \vec{r}_N) \cdot \Psi(\vec{r}', \dots, \vec{r}_N) d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_N \quad (1)$$

(підсумовування за усіма спіновими індексами опущено задля скорочення запису), стає можливим апроксимувати будь-яку фізичну властивість молекули, задану як сума

$$\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{a}(\vec{r}_i) \quad (2)$$

одночастинкових квантово-механічних операторів \hat{a} , її "локалізованим" відповідником у вигляді суми

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_i n_i A_i, \quad (3)$$

де

$$n_i = \int \varphi_i^{loc*}(\vec{r}) \cdot \gamma(\vec{r}, \vec{r}') \cdot \varphi_i^{loc}(\vec{r}') \cdot d\vec{r} d\vec{r}', \quad (4)$$

є заселеністю i -ої орбіталі, а величина

$$A_i = \langle \varphi_i^{loc} | \hat{a} | \varphi_i^{loc} \rangle \quad (5)$$

є внеском i -ої орбіталі у розглядувану фізичну властивість молекули.

В даній роботі здійснюється оцінка точності апроксимації (3) для оператора

$$\hat{a} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} e Z_{\alpha} \vec{R}_{\alpha} - e \vec{r} \quad (6)$$

дипольного моменту молекули, де $e Z_{\alpha}$ і \vec{R}_{α} – відповідно, заряд і вектор координат α -го ядра молекули. При цьому для одержання локалізованих орбіталей застосовується метод CLPO [1], обособленістю якого є властивість якнайточнішої (за нормою Фробеніуса $\|\gamma - \gamma^{loc}\|^2$) апроксимації істинної зведеної одноелектронної матриці густини $\gamma(\vec{r}, \vec{r}')$ (див. (1)) наближеним виразом

$$\gamma^{loc}(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i n_i \varphi_i^{loc}(\vec{r}) \varphi_i^{loc}(\vec{r}'), \quad (7)$$

побудованим із локалізованих орбіталей.

Матеріали і методи

Оцінка похибки апроксимації векторів дипольного моменту в рамках наближення (3) виконувалася для набору з 11410 електронейтральних 12-атомних молекул, що були взяті з бази PubChemQC [2] і склалися з атомів H, B, C, N, O, F, S, P, Al, As, Br, Cl, Ge, Se, Si, а також для набору з 613 конформерів молекули 2'-дезокситидин-5'-монофосфату [3]. У першому випадку використовували геометрії були додатково оптимізовані квантово-мезанічним методом B97-3с [4] теорії функціоналу густини з поправками, які дозволяють, зокрема, коректно описувати дисперсійну міжатомну взаємодію, з використанням програмного пакету ORCA версії

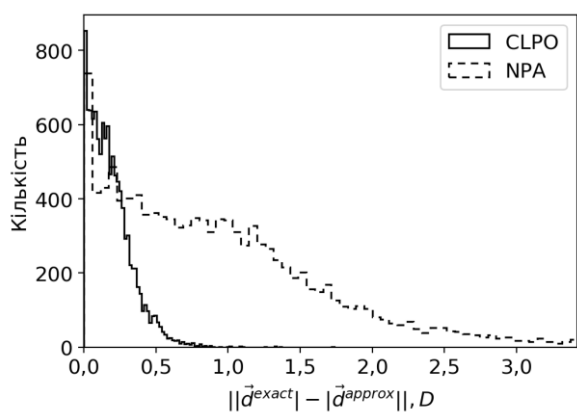
4.0.1 [5], а в другому випадку використовувалися одержані в роботі [3] геометрії, які були тримані у цій роботі в результаті оптимізації методом B3LYP/6-31G**.

Зведені одночастинкові матриці густини для всіх досліджуваних молекул одержували методом теорії збурень Мьоллера-Плессета 2-го порядку (MP2) з використанням набору базисних функцій Def2-TZVPP. Розрахунки проводили у пакеті Psi4 1.2.1 [6] без застосування FC-наближення, а одержувана матриця густини знаходилася з врахуванням релаксації орбіталей. Знайдені зведені одночастинкові матриці густини використовували для розрахунку істинних значень дипольних моментів досліджуваних молекул за формулами (3) і (5), використовуючи в останній орбіталі Льовдіна [7] замість локалізованих орбіталей.

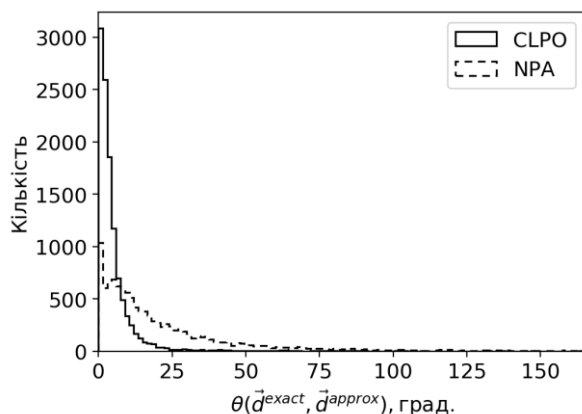
Локалізація орбіталей методом CLPO [1] проводилася у пакеті JANPA і з допомогою цього ж пакету розраховували внески кожної з локалізованих орбіталей до апроксимованого значення дипольного моменту за формулою (5). При цьому внесок заряду ядра кожного з атомів поділявся між локалізованими ЛНО-орбіталями цього атома аналогічно до схеми Руденберга [8], тим самим забезпечуючи електронейтральність окремо кожної із підсистем, складених з локалізованих орбіталей та асоційованих з ними частин заряду ядер. Істотно, що за такого підходу та частина заряду ядра атома, що не була асоційована з жодною з локалізованих орбіталей (а отже, дає внесок в дипольний момент як від точкового заряду, розміщеного на атомі), дорівнює NPA-заряду цього атома.

Результати та обговорення

Як величини, що характеризують відмінність між істинним \vec{d}^{exact} значенням дипольного моменту кожної з молекул (або її конформації) та його значенням \vec{d}^{approx} , розрахованим як сума (3) внесків (5) кожної з локалізованих орбіталей, використовували модуль $\left\| \vec{d}^{exact} - \vec{d}^{approx} \right\|$ різниці абсолютних величин $\left| \vec{d}^{exact} \right|$ та $\left| \vec{d}^{approx} \right|$ цих векторів, а також – кут $\theta(\vec{d}^{exact}, \vec{d}^{approx})$ між ними. Статистичні розподіли кожної з цих характеристик для набору з 11410 електронейтральних 12-атомних молекул представлені на рис. 1. На цьому ж рисунку для порівняння представлено аналогічні розподіли



a



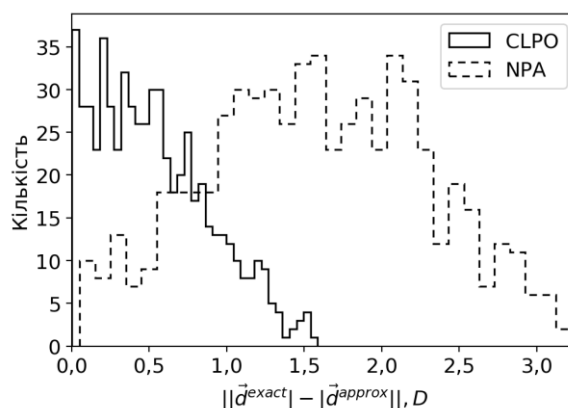
б

Рис. 1. Розподіл похибки апроксимації модуля дипольного моменту 12-атомних молекул (*a*) та кута між істинним \vec{d}^{exact} та апроксимованим \vec{d}^{approx} векторами дипольного моменту (*б*) при використанні моделей локалізованих CLPO-диполів та NPA-зарядів, розміщених на атомах.

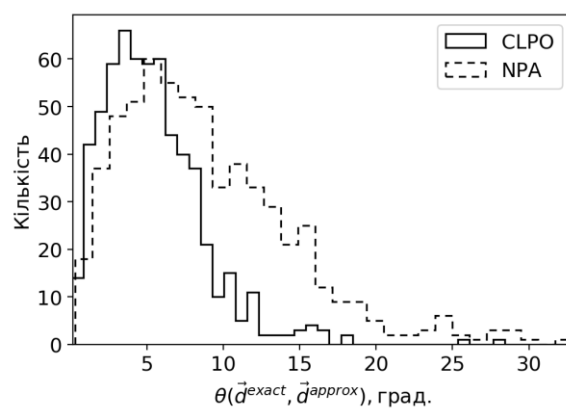
для випадку, коли вектор дипольного моменту апроксимувався системою точкових зарядів, розташованих на ядрах атомів. Величини зарядів при цьому розраховували методом NPA. Таким чином, різниця між модельними значеннями дипольного моменту в двох випадках, представлених на рис. 1, зводилася до внеску в дипольний момент від ковалентних зв'язків та неподілених електронних пар атомів.

Аналогічні результати для набору з 613 конформерів молекули 2'-дезокситидин-5'-монофосфату представлено на рис. 2.

При апроксимації дипольного моменту сумою внесків, обчислених у базисі CLPO, середнє значення модуля $\left\| \vec{d}^{exact} - \vec{d}^{approx} \right\|$ склало 0,19 D для дослідженого набору 12-атомних молекул та 0,53 D для конформерів 2'-



a



б

Рис. 2. Розподіл похибки апроксимації модуля дипольного моменту конформерів молекули 2'-дезокситидин-5'-монофосфату (*a*) та кута між істинним \vec{d}^{exact} та апроксимованим \vec{d}^{approx} векторами дипольного моменту (*б*) при використанні моделей локалізованих CLPO-диполів та NPA-зарядів, розміщених на атомах.

дезокситидин-5'-монофосфату. Аналогічні значення при використанні для апроксимації лише системи точкових NPA-зарядів склали 0,94 D та 1,59 D відповідно. Зважаючи на те, що середнє значення модуля дипольного моменту у досліджених 12-атомних молекул складало 2,84 D, а у конформерів 6,46 D, можна стверджувати, що врахування внеску ковалентних зв'язків та неподілених електронних пар, здійснене при використанні базису CLPO, істотно знижує похибку апроксимації модуля дипольного моменту. Врахування цих внесків знижує і середнє значення кута між істинним і апроксимованим векторами дипольного моменту: з 23,2° до 5,4° у випадку дослідженого набору 12-атомних молекул та з 9,1° до 5,4° у випадку конформерів 2'-дезокситидин-5'-монофосфату.

Висновки

Представлення зведеної одночастинкової матриці густини електронної підсистеми молекули в базисі локалізованих орбіталей, знайдених за методом CLPO, дає змогу представити вектор дипольного моменту

молекули як суму внесків від NPA-зарядів атомів, неподілених електронних пар атомів та двоатомних ковалентних зв'язків. Характерна величина похибка такого представлення складає 10% для модуля дипольного моменту і $5,5^\circ$ для кута між його істинним і апроксимованим векторами.

Список використаних джерел

1. Nikolaienko T. Yu. Localized orbitals for optimal decomposition of molecular properties / T. Yu. Nikolaienko, L. A. Bulavin // *Int J Quantum Chem.* – 2019. – Vol. 119. – e25798.
2. Nakata M. PubChemQC project: A large-scale first-principles electronic structure database for data-driven chemistry/ M. Nakata, T. Shimazaki // *Journal of chemical information and modeling.* – 2017. – Vol. 57. – p. 1300–1308.
3. Ніколаєнко Т.Ю. Квантово-механічний конформаційний аналіз молекули 2'-дезокситидилової кислоти – структурної ланки ДНК / Т.Ю.Ніколаєнко, Д.М.Говорун.// *Доповіді Національної академії наук України.* – 2010. – №9. – С. 173 - 184
4. B97-3c: A revised low-cost variant of the B97-D density functional method / J.G.Brandenburg, C. Bannwarth, A. Hansen [et al] // *The Journal of Chemical Physics.* – 2018. – Vol. 148. – p. 064104-1 – 064104-13.
5. Neese F. Software update: the ORCA program system, version 4.0 / F. Neese // *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science.* – 2018. – Vol. 8. – p. e1327.
6. Psi4 1.1: An open-source electronic structure program emphasizing automation, advanced libraries, and interoperability / R. M. Parrish, L. A. Burns, D. G. A. Smith, [et al] // *J. Chem. Theory Comput.* – 2017. – Vol. 13. – p. 3185–3197.
7. Löwdin. P. O. Quantum theory of many-particle systems. I. Physical interpretations by means of density matrices, natural spin-orbitals, and convergence problems in the method of configurational interaction / P. O. Löwdin. // *Phys. Rev.* – 1955. – Vol. 97. – p. 1474–1489
8. Ruedenberg K. The physical nature of the chemical bond / K. Ruedenberg,. *Reviews of Modern Physics.* – 1962. – Vol. 34. – p. 326 – 376.

References

1. NIKOLAIENKO, T. YU. & BULAVIN, L.A. (2019) Localized orbitals for optimal decomposition of molecular properties, *Int J Quantum Chem.*, 119, e25798.
2. NAKATA, M., & SHIMAZAKI T.(2017) PubChemQC project: A large-scale first-principles electronic structure database for data-driven chemistry, *Journal of chemical information and modeling*, 57, 1300–1308.
3. NIKOLAIENKO, T.YU & HOVORUN, D.M. (2010) Qantum-mechanical conformational analysis of 2'-deoxycytidilic acid molecule – the DNA structural unit, *Dopov. Nac. akad. nauk Ukr.*, N1, 7-13.
4. BRANDENBURG, J. G., BANNWARTH, C., HANSEN, A., & GRIMME, S. (2018). B97-3c: A revised low-cost variant of the B97-D density functional method. *The Journal of chemical physics*, 148(6), 064104.
5. NEESE, F. (2018) Software update: the ORCA program system, version 4.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 8, e1327.
6. PARRISH, R. M., BURNS, L. A., SMITH, D. G., SIMMONETT, A. C., DEPRINCE III, A. E., HOHENSTEIN, E. G., ... & GONTHIER, J. F. (2017). Psi4 1.1: An open-source electronic structure program emphasizing automation, advanced libraries, and interoperability. *Journal of chemical theory and computation*, 13(7), 3185-3197.
7. LÖWDIN. P. O. (1955) Quantum theory of many-particle systems. I. Physical interpretations by means of density matrices, natural spin-orbitals, and convergence problems in the method of configurational interaction. *Phys. Rev.*, 97, 1474–1489.
8. RUEDENBERG K. (1962) The physical nature of the chemical bond. *Reviews of Modern Physics*, 34, 326 – 3767.

Надійшла до редколегії 14.06.18

УДК 539

Сиволожський О. А., студ.,
Овсієнко І. В., к.ф.-м.н., доц.,
Мацуй Л. Ю., д.ф.м.н., с. н. с.,
Лень Т. А. к.ф.м.н.

Особливості інтеркаляції вуглецевих наноматеріалів, що містять нанотрубки

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул.
Володимирська 64/13
e-mail: mail.olexiy@gmail.com

O. A. Syvolozhskiy, Stud.,
I. V. Ovsiienko, Ph D, as. prof.,
L. Yu. Matzui, Dr. Sci., Sen. Sci. Res.,
T. A. Len, Ph D.

The peculiarity of intercalation of carbon nanomaterials containing nanotubes

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13
e-mail: mail.olexiy@gmail.com

Розглянуто можливість інтеркаляції вуглецевих наноматеріалів, що містять вуглецеві нанотрубки. Вуглецеві наноматеріали, що містять багатостінні вуглецеві нанотрубки різної структури і розміру, були інтеркальовані хлоридом йоду за стандартною однотою температурною методикою. Як показали електронномікроскопічні дослідження, розмір і морфологія вуглецевих нанотрубок після інтеркаляції істотно змінюються. Діаметр вуглецевих нанотрубок збільшується більше ніж в два рази, що пояснюється проникненням молекул хлориду йоду між шарами багатостінної вуглецевої нанотрубки або у внутрішню порожнину нанотрубок. За даними рентгенівської дифракції положення найбільш інтенсивної смуги в 00l-дифрактограмі вуглецевого наноматеріалу після інтеркаляції зсувається в область менших кутів. Точне кутове положення 00l смуги відповідає відбиттям від шарів інтеркалянту для сполуки третьої стадії. В температурній залежності питомого опору для об'ємних зразків інтеркальованих вуглецевих наноматеріалів спостерігається температурний гістерезис. Даний гістерезис пояснюється зміною ефективного часу релаксації носіїв заряду при їх розсіюванні на фонах графітового шару і шару інтеркалянта при фазовому переході в шарах інтеркалянта з впорядкованого «квазікристалічного стану» в невпорядкований «квазірідкий» стан.

Ключові слова: вуглецеві наноматеріали, інтеркаляція, гістерезис.

The possibility of intercalation of carbon nanomaterials containing carbon nanotubes is considered. Carbon nanomaterials containing multiwall carbon nanotubes of different structure and size were intercalated by iodine chloride with use standard one-temperature method. As it is shown by electron microscopic studies, after intercalation the size and morphology of carbon nanotubes are essentially changed. The diameter of carbon nanotubes increases two times more. This increase in diameter is due to the penetration of iodine chloride molecules between layers of a multiwall carbon nanotubes or into the inner cavity of nanotubes. According to X-ray diffraction, the position of the most intense band in the 00l-diffractogram of carbon nanomaterial moves to the region of smaller angles after intercalation. The exact angular position of the 00l-band corresponds to reflection from the intercalate layers for the third stage compound. The hysteresis in the temperature dependence of resistivity for compacted intercalated carbon nanomaterial is observed. This hysteresis is explained by the change of the charge carriers effective relaxation time at the scattering on the phonons of the graphite layer and the intercalate layer. Such change occurs at the phase transitions in the intercalate layers from an ordered "quasicrystalline state" to an unordered "quasiliquid" state.

Key Words: carbon nanomaterial, intercalation, hysteresis .

Статтю представив член-кор. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Інтеркаляція нановуглецевих матеріалів (ВНМ), зокрема, вуглецевих нанотрубок (ВНТ), має значний інтерес у зв'язку з можливістю

цілеспрямованої зміни зонної структури і, відповідно, можливості отримання ВНМ з новими унікальними властивостями [1]. Експериментальне дослідження цілого ряду

властивостей, експериментальне спостереження яких є проблематичних для інших матеріалів, можливе для інтеркальованих сполук графіту (ІСГ). Серед таких унікальних властивостей треба відмітити ефект фононного захоплення носіїв заряду, [2], низькотемпературні квантові ефекти слабкої локалізації та взаємодії носіїв заряду [1], структурні фазові переходи в 2D-системах [3-5]. Зазначені властивості досліджуються в інтеркальованих сполуках на основі об'ємного графіту. Проте, питання отримання інтеркальованих сполук на основі вуглецевих нанотрубок, а також властивості таких інтеркальованих сполук вивчені набагато менше.

В даній роботі розглянуто можливість отримання інтеркальованих сполук на основі ВНМ, що містить вуглецеві нанотрубки, з хлоридом йоду, а також наведені результати експериментальних досліджень структури та опору для інтеркальованого ВНМ в широкому інтервалі температур.

Експериментальні результати та обговорення

Для інтеркаляції були обрані зразки ВНМ, що містять багатостінні вуглецеві нанотрубки, двох типів. Зразок №1 містить багатостінні ВНТ з структурою типу «бамбук». Зразок №2 містить багатостінні ВНТ діаметром від 50 нм до 200 нм. Інтеркаляція вихідних вуглецевих наноматеріалів хлоридом йоду була проведена за стандартною одотемпературною методикою при температурі ~ 330 К. Структура інтеркальованого ВНМ досліджувалася методами рентгенівської дифракції та електронної мікроскопії.

Для вимірювання температурної залежності електроопору об'ємні зразки інтеркальованого ВНМ у вигляді прямокутних паралелепіпедів розмірами 15×3.5×1.5 мм були виготовлені методом холодного пресування без зв'язуючого (зр. №1), або з використанням в якості зв'язуючого ПВА (25 мас.%) (зр. №2). Електричний опір зразків інтеркальованого ВНМ досліджувався в температурному інтервалі (77-293) К стандартним чотирьохзондовим методом. Похибка вимірювання електроопору складала 0.5 %.

Результати і обговорення

На рис. 1 наведені типові СЕМ-зображення ВНМ, що містять ВНТ до (а) і після (б) інтеркаляції (зразок №2).

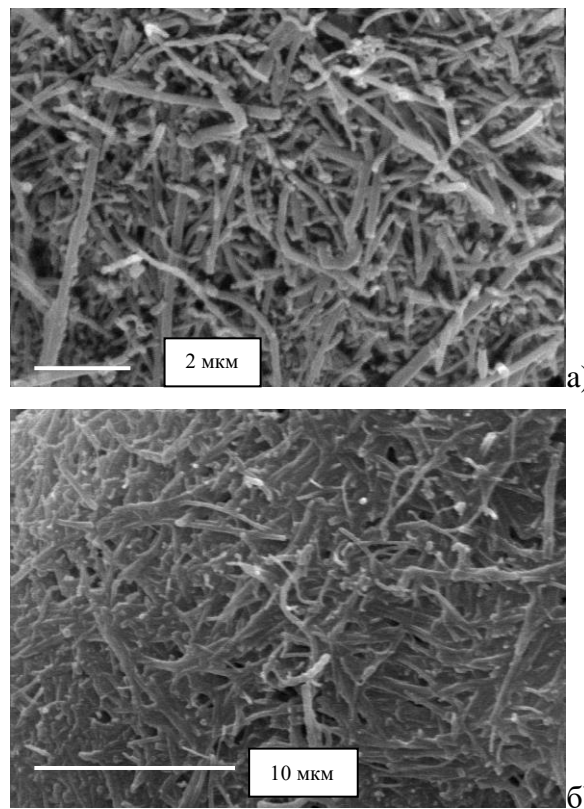
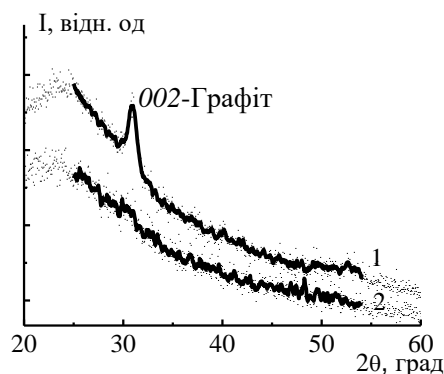


Рис. 1. Типові СЕМ-зображення ВНМ (зразок №2), що містить ВНТ до (а) і після (б) інтеркаляції.

Як видно з рисунку, вихідний ВНМ містить багатостінні ВНТ та трубчасті структури з діаметром від ~ 100 нм до 200 нм. Після інтеркаляції діаметр ВНТ збільшується і складає від 150 нм до 450 нм. Таке збільшення діаметра ВНТ пояснюється проникненням молекул хлориду йоду між шарами багатостінної ВНТ або у внутрішню порожнину нанотрубок.

Фрагменти рентгенівських дифрактограм вихідних та інтеркальованих зразків ВНМ наведені на рисунках 2а (зразок №1) та 2б (зразок №2).



а)

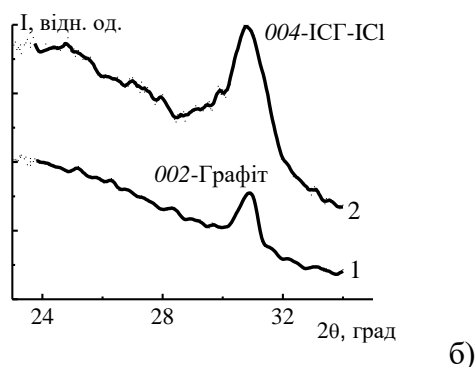


Рис. 2. Фрагменти рентгенівських дифрактограм зразків ВНМ №1 (а) та №2 (б) до інтеркаляції (1) та після інтеркаляції (2).

Як видно з рисунку, для обох зразків ВНМ до інтеркаляції на рентгенівських дифрактограмах спостерігаються інтенсивні графітові 002-смуги, що вказує на присутність в ВНМ впорядкованої графітової структури. Для зразка №1 позиція 002-графітової смуги відповідає відбиттям від графітових площин з міжшаровою відстанню $d_{002} = 0.336$ нм, а для зразка №2, відповідно, $d_{002} = 0.337$ нм. Обидва значення d_{002} є дещо більшими в порівнянні із значенням d_{002} для високоорієнтованого піролітичного графіту (0.335 нм).

Як впливає з рисунку 2(а), для зразка вихідного ВНМ №1 002-графітова смуга після інтеркаляції зникає. Така ситуація суттєво відрізняється від інтеркаляції об'ємних зразків піролітичного графіту. Як відомо, при інтеркаляції графіту в міжшаровому просторі графіту утворюється суцільний мономолекулярний або моноатомний шар речовини-інтеркалянту. Кількість шарів графіту між двома шарами інтеркалянта визначає стадію S інтеркальованої сполуки, а відстань між двома послідовними шарами інтеркалянта, між якими знаходяться графітові шари, називається параметром ідентичності I_s інтеркальованої сполуки. Формування шарів інтеркалянту між графітовими шарами призводить до появи на рентгенівській дифрактограмі інтеркальованої сполуки цілої системи нових ліній, що відповідають відбиттям від шарів інтеркалянта. Таким чином, відсутність будь-яких смуг на дифрактограмі для зразка ВНМ №1 після інтеркаляції вказує на те, що в цьому зразку не утворилася інтеркальована сполука. Більш того, зникнення графітової 002-лінії на рентгенівській дифрактограмі після реакції інтеркалювання пов'язано, очевидно, із значним зростанням кількості дефектів у вихідних ВНТ в процесі

інтеркаляції, а також з можливим руйнуванням будь-яких впорядкованих графітових структур.

Для зразка №2 після інтеркаляції кутове положення найбільш інтенсивної смуги дещо зсувається в область менших кутів (рис. 2б), що вказує на утворення інтеркальованої сполуки. Детальний аналіз рентгенівської дифрактограми з використанням рівняння Вульфа-Брегга для інтеркальованих сполук: $2 \cdot I_s \cdot \sin \theta = I\lambda$, де I_s – параметр ідентичності інтеркальованої сполуки, λ – довжина рентгенівської хвилі ($\lambda = 0.17902$ нм), показав, що положення найбільш інтенсивної лінії відповідає відбиттям від шарів інтеркалянта для сполуки третьої стадії. Таким чином, в результаті інтеркаляції вихідного ВНМ (зразок №2) хлоридом йоду була отримана інтеркальована сполука третьої стадії.

На рис. 3 наведені результати досліджень температурної залежності електроопору для зразків інтеркальованих ВНМ.

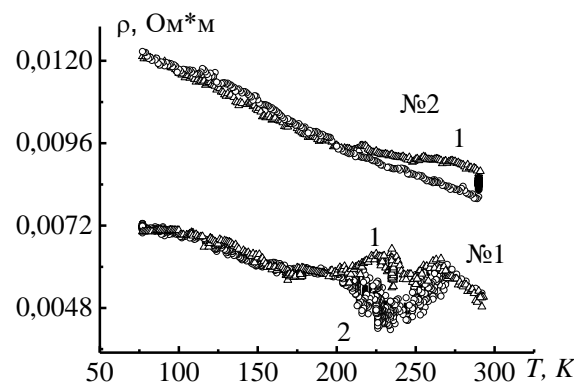


Рис. 3. Температурні залежності питомого електроопору $\rho(T)$ для зразків інтеркальованих ВНМ №1 та №2: 1 - повільне нагрівання, 2 - повільне охолодження.

Як видно з рисунку, для обох зразків інтеркальованих ВНМ спостерігається спадаюча залежність питомого електроопору від температури. Для зразка №2 в температурній залежності електроопору в інтервалі температур від 200 К до 260 К присутній яскраво виражений гістерезис. Для зразка інтеркальованого ВНМ №1 також спостерігається гістерезис в температурній залежності питомого опору, але величина його суттєво менша, а сам він зміщений в область дещо вищих температур.

Як показано в ряді робіт, аналогічний гістерезис спостерігається в залежності електроопору для сполук на основі дрібнокристалічного графіту з хлоридом йоду [6-8] і пояснюється зміною ефективного часу

релаксації носіїв заряду при фазовому переході в шарах інтеркалянта з впорядкованого «квазікристалічного стану» в неупорядкований «квазірідкий» стан.

Висновки

Таким чином, проведені дослідження виявили, що здатність НВМ, що містить ВНТ, до інтеркаляції визначається особливостями структури ВНТ. Інтеркаляція ВНТ досконалої структури з замкненими графітовими шарами або

не відбувається, або приводить до руйнації ВНТ. При інтеркаляції ВНТ з значною кількістю дефектів, утворюються інтеркальовані сполуки, стадія яких залежить від умов отримання. Для інтеркальованого хлоридом йоду НВМ виявлений гістерезис в температурній залежності електроопору, природа якого пов'язані з фазовим переходом типу «порядок-безпорядок» в шарах інтеркалянта.

Список використаних джерел

1. Issi JP. Transport in acceptor GICs: have our efforts been rewarded / JP. Issi // *Materials Science Forum* – 1992. – Vol. 91-93. – P. 471-480.
2. Matzui L. Phonon drag in GIC based on disordered graphite / L. Matzui, I. Ovsienko, L. Vovchenko // *Mol. Cryst. and Liq. Cryst* – 2000. – Vol. 340(1) – P. 319-324.
3. Matsubara K. A- and c-axis resistivity and magnetoresistance in MoCl₅ graphite intercalation compounds / K. Matsubara, K. Sugihara, I-S. Suzuki and oth. // *J. Phys. Condens. Matter* – 1999. – Vol. 11. – P. 3149–3160.
4. Andersson OE. A study of temperature and pressure induced structural and electronic changes in SbCl₅ intercalated graphite: Part II. Experimental data for c-axis resistivity / OE. Andersson, B. Sundqvist, E. McRae and oth. // *J. Mater. Res.* – 1992. – Vol. 7(11) – P. 2989-3000.
5. Yaya A. Bromination of graphene and graphite / A. Yaya, CP. Ewels, I. Suarez-Martinez and oth. // *Phys. Rev. B.* – 2011. – Vol. 83. – P. 045411.
6. Kobayashi K. Thermoelectric power of graphite intercalation compounds with iodine monochloride / K. Kobayashi, K. Sugihara, H. Oshima and oth. // *J. Phys. Soc. Jap.* – 1994. – Vol. 63(12) – P. 4451-4455.
7. Matzui L. The influence of initial graphite structure on the character of phase transformations in GIC with iodine and stibium chlorides. Abstracts, EuroCarbon – 2000 / L. Matzui, L. Vovchenko, I. Ovsienko // *1st World Conference on Carbon Germany, Berlin* – 2000. – Vol. 2. – P. 851-852.
8. Prokopov O. Peculiarities of charge transfer in graphite intercalation compounds with bromine and iodine chloride / O. Prokopov, I. Ovsienko, L. Matzui and oth. // *Proceeding in Physics* – 2017. – Vol. 145. – P. 771-787.

References

1. ISSI, JP. (1992) Transport in acceptor GICs: have our efforts been rewarded. *Materials Science Forum*. 91-93. p. 471-480.
2. MATZUI, L., OVSIENKO, I. and VOVCHENKO, L. (2000) Phonon drag in GIC based on disordered graphite. *Mol. Cryst. and Liq. Cryst.* 340(1). p. 319-324.
3. MATSUBARA, K., SUGIHARA, K., SUZUKI, I-S. and SUZUKI, M. (1999) A- and c-axis resistivity and magnetoresistance in MoCl₅ graphite intercalation compounds. *J. Phys. Condens. Matter*. 11. p. 3149–3160.
4. ANDERSSON, OE., SUNDQVIST, B., MCRAE, E., MARÊCHÉ, JF. and LELAURAIN, M. (1992) A study of temperature and pressure induced structural and electronic changes in SbCl₅ intercalated graphite: Part II. Experimental data for c-axis resistivity. *J. Mater. Res.* 7(11). p. 2989-3000.
5. YAYA, A., EWELS, CP., SUAREZ-MARTINEZ, I., WAGNER, PH., LEFRANT, S., OKOTRUB, A., BULUSHEVA, L. and BRIDDON, PR. (2011) Bromination of graphene and graphite. *Phys. Rev.* 83. p. 045411.
6. KOBAYASHI, K., SUGIHARA, K., OSHIMA, H. and TSUZUKU, T. (1994) Thermoelectric power of graphite intercalation compounds with iodine monochloride. *J. Phys. Soc.* 63(12). p. 4451-4455.
7. MATZUI, L., VOVCHENKO, L. and OVSIENKO, I. (2000) The influence of initial graphite structure on the character of phase transformations in GIC with iodine and stibium chlorides. *EuroCarbon – 2000, 1st World Conference on Carbon Germany, Berlin*. 2. p. 851-852.
8. PROKOPOV O, OVSIENKO I, MATZUI L, ZLOI O, BOROVOYN, LEN T and NAUMOVA D. (2017) Peculiarities of charge transfer in graphite intercalation compounds with bromine and iodine chloride. *Proceeding in Physics*. 145. p. 771-787.

Надійшла до редколегії 04.09.18

Підписано до друку _____ . Формат _____ . Друк. офс.
Папір офс. № __ . Друк. арк. ____ . Тираж _____ . Зам. ____ .
Друкарня _____ .