КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

В І С Н И К

КИЇВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

СЕРІЯ ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

ВИПУСК №2 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", "Физика", "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, радіофізичного, механіко-математичного факультетів та факультету 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 та базах даних ВИНИТИ, Росія, Москва.

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
ISBN 978-966-2142
ISSN 1812-5409

ЗМІСТ

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

РАДІОФІЗИКА

СУЧАСНА ФІЗИКА

CONTENTS

ALGEBRA, GEOMETRY AND PROBABILITY THEORY

DIFFERENTIAL EQUATIONS, MATHEMATICAL PHYSICS AND MECHANICS

COMPUTER SCIENCES AND INFORMATICS

RADIOPHYSICS

MODERN PHYSICS

АЛГЕБРА, ГЕОМЕТРІЯ ТА ТЕОРІЯ ІМОВІРНОСТЕЙ

УДК 519.17

Дмитро І. Безущак, *магістр*

Біциклічні напівгрупи перетворень, що зберігають відношення еквівалентності

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64,
e-mail: bezushchak@gmail.com

Dmytro I. Bezushchak, *Master-student*

Bicyclic semigroups of transformations preserving equivalence relation

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska str.,

e-mail: bezushchak@gmail.com

Кажуть, що перетворення α із напівгрупи (S, M) перетворень (можливо, часткових) множини M зберігає відношення еквівалентності ρ на M, якщо з того, що пара (x, y) належить ρ випливає, що пара $(\alpha(x), \alpha(y))$ також належить ρ для довільних x, y з області визначення $\operatorname{dom}\alpha$. Множина $S^{(\rho)}$ усіх перетворень із S, які зберігають дане відношення ρ, утворює піднапівгрупу напівгрупи (S, M). У роботі вивчаються властивості $S^{(\rho)}$ у випадку, коли S є біциклічною напівгрупою перетворень.

Ключові слова: відношення еквівалентності, напівгрупа перетворень, біциклічна напівгрупа.

It is said, that a transformation α that operates from the semigroup (S, M) of transformations (that may be partially defined) of a set M preserve an equivalence relation ρ on M, if $(x, y) \in \rho \Rightarrow (\alpha(x), \alpha(y)) \in \rho$ for every $x, y \in \operatorname{dom}\alpha$. A set $S^{(\rho)}$ of all transformations from S, that preserve the given relation ρ, creates a subsemigroup of a semigroup (S, M). In the paper properties of $S^{(\rho)}$ are studied, in the case, when S is a bicyclic semigroup of transformations.

It is verified for which equivalence classes of an equivalence relation ρ on a set $\mathbb{N}$ the semigroup $B^{(\rho)}$ will be non-trivial, where B be a natural representation of a bicyclic semigroup by transformations of a set $\mathbb{N}$.

Key Words: equivalence relation, semigroup of transformations, bicyclic semigroups.
Communicated by Prof. Kirichenko V.V.

1 Introduction

Let (S, M) be the semigroup of transformations of the set M, that may be partially defined (meaning that S is a subsemigroup of the semigroup $\mathcal{PT}(M)$ of all partially defined transformations of the set M). The transformation $\alpha \in S$ is said to be preserving the relation ρ on the set M, if $(x, y) \in \rho$ implies that $(\alpha(x), \alpha(y)) \in \rho$ for every x, y from domain $\operatorname{dom}\alpha$. The set of all transformations from S, that preserve the given relation ρ, creates a subsemigroup of the semigroup (S, M), that will be denoted by $S^{(\rho)}$. In corner situations, when ρ coincides with an equality relation or with the total relation $M \times M$ all of transformations of the semigroup (S, M) preserve this relation.

Semigroups $S^{(\rho)}$ for different relations ρ are being studied for a long time. Especially the case, when ρ is a relation of a partial or a linear order on M (for example, see Chapter 14 from [1] and the provided bibliography there). But during the last years the case, when ρ is an equivalence relation, had grabbed significant attention.

First of all for such semigroups the conditions of regularity of elements and Green relations are studied (examples [2] and [3]). Sometimes the relations from $S^{(\rho)}$ are being affected by several restrictions. For instance it may be required the preservation of a relation of a partial or a linear order ([4], [5]), or a cross-section of a set of classes of an equivalence ([6]), or instead of the implication $(x, y) \in \rho \Rightarrow (\alpha(x), \alpha(y)) \in \rho$ the equivalence is required ([7]). Also different subsemigroups classes of the semigroup $S^{(\rho)}$ are studied ([6], [8]).

We verify for which an equivalence relation ρ on a set $\mathbb{N}$ the semigroup $B^{(\rho)}$ will be non-trivial, where B be a natural representation of a bicyclic semigroup by transformations of a set $\mathbb{N}$.

We will be using the terminology and notations from [1].

2 Bicyclic finite semigroups of transformations

Let $a \in \mathbb{N}$ and $[a, \infty) = \{n \in \mathbb{N} \mid n \geqslant a\}$. For any $a, b \in \mathbb{N}$ by $\alpha_{a,b}$ we will be denoting the mapping

$$\alpha_{a,b} : [a, \infty) \to [b, \infty), a + x \mapsto b + x$$

for every $x \geqslant 0$.

The set $B = \{\alpha_{a,b} \mid a, b \in \mathbb{N}\}$ creates a bicyclic subsemigroup of the inverse symmetric semigroup $\mathcal{IS}(\mathbb{N})$ of all partially injective transformations. The unit element $\alpha_{1,1}$ of the semigroup B preserves all the equivalence relations on $\mathbb{N}$. We will be interested in the problem, for which relations ρ from the set $\mathrm{Eq}\,(\mathbb{N})$ of all equivalence relations on the set $\mathbb{N}$ semigroup $B^{(\rho)}$ will be non unit.

Let us recall that the graph of action of an element $\alpha \in \mathcal{IS}(\mathbb{N})$ is called an directed graph Γ_α with the set of nodes $\mathbb{N}$ and the set of arcs $\{(x, \alpha(x)) \mid x \in \mathrm{dom}\alpha\}$.

Lemma 1. *If the cyclic semigroup $\langle\alpha_{1,2}\rangle$ preserves an equivalence relation ρ on $\mathbb{N}$, that is different from the equality relation, then there exist such p and q, that ρ has $p - 1$ one-element equivalence classes $\{1\}$, $\{2\}$, ..., $\{p - 1\}$ and q infinite equivalence classes in the form of*

$$\{p + i + kq \mid k \geqslant 0\}, \quad i = 0, 1, \dots, q - 1.$$

Proof. The graph of the action $\alpha_{1,2}$ takes the form of

$$1 \to 2 \to 3 \to 4 \to 5 \to \cdots.$$

Let p be the smallest element from $\mathbb{N}$, that belong to some equivalence class $M = M_1$ of the relation ρ, that consists of more than one element, and let the next element from M take the form of $p + q$. $(p, p + q) \in \rho$ implies that the pair

$$(p + q, p + 2q) = (\alpha_{1,2}^q(p), \alpha_{1,2}^q(p + q))$$

also belongs to ρ. Then $p + 2q$ also belongs to the class M. The proof is similar for the case of values

$$p + 3q, p + 4q, \dots$$

and they also belong to the class M. So, M contains infinite arithmetic progression with the first component p and the difference q. Since semigroup $\langle\alpha_{1,2}\rangle$ preserves the relation ρ, than the arithmetic progression with the first component $p+1$ and the difference q has to be included in some equivalence class M_2, that contains $\alpha_{1,2}(M)$, ..., arithmetic progression with the first component $p+q-1$ and the difference q has to be included in equivalence class M_q, that contains

$$\alpha_{1,2}^{q-1}(M).$$

The draft of the elements p and q implies, that classes M_1, M_2, ..., M_q do not intersect pairwise. On the other hand, arythmetic progressions with the difference q and the first components p, $p+1$, ..., $p+q-1$ correspondingly can fully cover the set $[p, \infty)$. Therefore classes M_1, M_2, ..., M_q coincide with corresponding arithmetic progressions. □

Remark. The lemma 1 implies, that the set of equivalence relations on $\mathbb{N}$, that the cyclic group $\langle\alpha_{1,2}\rangle$ preserves, coincide with the set of congruences on the semigroup $(\mathbb{N}, +)$.

Lemma 2. *If the cyclic semigroup $\langle\alpha_{2,1}\rangle$ preserves an equivalence relation ρ on $\mathbb{N}$, that is different from the equality relation, then there either exists such q, that ρ has q infinite classes in the form of $\{i + kq \mid k \geqslant 0\}$, $i = 1, 2, \dots, q$, or there exist such numbers p and q, that all $n > p$ create classes $\{n\}$, that consist of one element, while $n \leqslant p$ are distributed into classes*

$$\{p - i, p - i - q, p - i - 2q, \dots\}, \quad i = 0, 1, \dots, q - 1.$$

Proof. The graph of the action $\alpha_{2,1}$ takes the form of

$$1 \leftarrow 2 \leftarrow 3 \leftarrow 4 \leftarrow 5 \leftarrow \cdots.$$

Let the number t' belong to some equivalence class M of the relation ρ, that consists of more than one element. Without losing the generality we can consider, that $M \cap [1, t' - 1] \neq \varnothing$, and let $t' - q'$ be the largest element of this set. Repeating the considerations from the proof of the lema 1, one may show that there exists a number q', that the equivalence classes of restrictions $\rho_{[1,t']}$ on the set $[1, t']$ will be arithmetic progressions

$$\{t' - i, t' - i - q', t' - i - 2q', \dots\},$$

$i = 0, 1, \dots, q' - 1$. If now the number $t'' > t'$ also belongs to some non-trivial class of the relation ρ, the similar proof is for the number q'', and that equivalence classes of restrictions $\rho_{[1,t'']}$ on the set $[1, t'']$ will be arithmetic progressions

$$\{t''-i, t''-i-q'', t''-i-2q'', \dots\}, i = 0, 1, \dots, q''-1.$$

But $\rho_{[1,t']}$ is a restriction of the relation $\rho_{[1,t'']}$ on $[1, t']$, so $q' = q'' = q$.

Now two variants are possible: either there is no greatest class among non-trivial classes (then previous considerations imply that equivalence classes of the relation ρ will be q infinite arithmetic progressions $\{i+kq \mid k \geqslant 0\}$, $i=1,2,\dots,q$), or among elements from classes that consist of more than one element there exists the greatest element p (then all of the values $n>p$ generate one-element classes $\{n\}$ and the values $n \leqslant p$ are distributed into equivalence classes $\{p-i, p-i-q, p-i-2q, \dots\}$, $i=0,1,\dots,q-1$.) $\square$

Theorem 1. *Let the relation $\rho \in \mathrm{Eq}(\mathbb{N})$ be different from an equality relation and from $\mathbb{N}\times\mathbb{N}$. The semigroup $B^{(\rho)}$ will be non-trivial if and only if one of the two conditions holds*:

1) *There exists such a, d and d pairs (p_j, q_j), $j=0,1,\dots,d-1$, that a restriction of the relation ρ on the set $\{a+j+md \mid m \in \mathbb{N}_0\}$ has p_j-1 one-element equivalence classes*

$$\{a+j\},\ \{a+j+d\},\ \dots,\ \{a+j+(p_j-1)d\}$$

and q_j infinite classes in the form of

$$\{p_j+i+kdq_j \mid k \geqslant 0\}, \quad i=0,1,\dots,q_j-1.$$

Moreover, the elements from the set $\{1,2,\dots,a-1\}$ can be either randomly united to other equivalence classes of the relation ρ, or generate separate equivalence classes.

2) *There exists such b, d and d pairs (p_j, q_j), $j=0,1,\dots,d-1$, that a restriction of the relation ρ on the set $\{b+j+md \mid m \in \mathbb{N}_0\}$ has either q_j infinite equivalence classes in the form of*

$$\{b+j+kdq_j \mid k \geqslant 0\}, \quad j=1,2,\dots,q_j,$$

or all the values $b+j+ndq_j$ $(n>p_j)$ create one-element blocks, while values $b+j+ndq_j$ $(n \leqslant p_j)$ are distributed into blocks

$$\{b+j+p_jdq_j-i, b+j+(p_j-1)dq_j-i,$$

$$b+j+(p_j-2)dq_j-i, \dots\}, \quad i=0,1,\dots,q_j-1).$$

Moreover, the elements of the set $\{1,2,\dots,b-1\}$ can be either randomly united to other equivalence classes of the relation ρ, or generate separate equivalence classes.

Proof. If the semigroup $B^{(\rho)}$ is non unit, then there exists an element $\alpha_{a,b} \neq \alpha_{1,1}$, that preserves the relation ρ.

1) Let us consider the case $b=a+d$, $d>0$. In this case connected components of the graph $\Gamma_{\alpha_{a,b}}$ are $a-1$ isolated nodes 1, 2, …, $a-1$ and d trails

$$a \to a{+}d \to a{+}2d \to a{+}3d \to \cdots,$$
$$a{+}1 \to a{+}1{+}d \to a{+}1{+}2d \to a{+}1{+}3d \to \cdots,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$a{+}(d{-}1) \to a{+}(d{-}1){+}d \to a{+}(d{-}1){+}2d \to$$
$$\to a{+}(d{-}1){+}3d \to \cdots.$$

The set $A=\{1,2,\dots,a-1\}$ and each of the sets $A_j=\{a+j+md \mid m \in \mathbb{N}_0\}$, $j=0,1,\dots,d-1$, are invariant to the semigroup action $\langle\alpha_{a,b}\rangle$, moreover the action $\langle\alpha_{a,b}\rangle$ on A_j is similar to the semigroup action $\langle\alpha_{1,2}\rangle$ on $\mathbb{N}$.

By the lema 1 for each set A_j there exist such values p_j and q_j, that the restriction $\rho\cap(A_j\times A_j)$ of the relation ρ on the set A_j has p_j-1 equivalence classes $\{a+j\}$, $\{a+j+d\}$, …, $\{a+j+(p-1)d\}$, that consist of one element, and q_j infinite equivalence classes in the form of $\{p_j+i+kdq_j \mid k \geqslant 0\}$, $i=0,1,\dots,q_j-1$.

The transformation $\alpha_{a,b}$ is not identified on the elements from A, so these elements can be either randomly united to other equivalence classes of the relation ρ, or generate separate equivalence classes.

2) Now let $b=a-d$, $d>0$. In such a case, the connected components of the graph $\Gamma_{\alpha_{a,b}}$ are $b-1$ isolated nodes 1, 2, …, $b-1$ and d trails

$$b \leftarrow b{+}d \leftarrow b{+}2d \leftarrow b{+}3d \leftarrow \cdots,$$
$$b{+}1 \leftarrow b{+}1{+}d \leftarrow b{+}1{+}2d \leftarrow b{+}1{+}3d \leftarrow \cdots,$$
$$\cdots\cdots\cdots\cdots$$
$$b{+}(d{-}1) \leftarrow b{+}(d{-}1){+}d \leftarrow b{+}(d{-}1){+}2d \leftarrow$$
$$\leftarrow b{+}(d{-}1){+}3d \leftarrow \cdots.$$

The set $B=\{1,2,\dots,b-1\}$ and each of the sets $B_j=\{b+j+md \mid m \in \mathbb{N}_0\}$, $j=0,1,\dots,d-1$, are invariant to the action of the semigroup $\langle\alpha_{a,b}\rangle$, moreover the action $\langle\alpha_{a,b}\rangle$ on B_j is similar to the action of the semigroup $\langle\alpha_{2,1}\rangle$ on $\mathbb{N}$.

To finish the proof in this case, it is necessary to repeat the considerations, that are likewise the previous case, changing the lema 1 by the lema 2. $\square$

Список використаних джерел

1. Ganyushkin O. Classical Finite Transformation Semirgoups. An Introduction / Ganyushkin O., Mazorchuk V. / Algebra and Applications Vol. **9**.– Springer–Verlag, London.– 2009.– 340 p.

2. Pei H. Regularity and Green's relations for semigroups of transformations that preserve an equivalence / Pei H. // Comm. Algebra **33** (2005), No.1.– P. 109–118.

3. Sun L. Green's Relations on Semigroups of Transformations Preserving Two Equivalence Relations / Sun L., Pei H. // Journal of Mathematical Research & Exposition.– **29**, No.3 (2009).– P. 415–422.

4. Sun L. Regularity and Green's relations for semigroups of transformations preserving orientation and an equivalence / Sun L., Pei H., Cheng Zh. // Semigroup Forum.– **74** (2007).– P. 473–486.

5. Pei H. Green's equivalences on semigroups of transformations preserving order and an equivalence relation / Pei H., Dingyn Z. // Semigroup Forum.– **71** (2005).– P. 241–251.

6. Araújo J. Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation and a Cross-Section / Araújo J., Konieczny J. // Communications in Algebra.– **32** (2004).– P. 1917-1935.

7. Sun L. A partial order on transformation semigroups that preserve double direction equivalence relation / Sun L. // Journal of Algebra and Its Applications, 12(08).– July 2013.

8. Pei H. Abundant Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation / Pei H., Zhou H. // Algebra Colloquium – 2011.– **18**, No.01.– P. 77-82.

References

1. GANYUSHKIN, O., MAZORCHUK, V. (2009) "Classical Finite Transformation Semirgoups. An Introduction", Algebra and Applications Vol. **9**, Springer–Verlag, London, 340 p.

2. PEI, H. (2005) "Regularity and Green's relations for semigroups of transformations that preserve an equivalence", Comm. Algebra **33**, No.1, pp.109–118.

3. SUN, L., PEI, H. (2009) "Green's Relations on Semigroups of Transformations Preserving Two Equivalence Relations", Journal of Mathematical Research & Exposition **29**, No.3, pp. 415–422.

4. SUN, L., PEI, H., CHENG, ZH. (2007) "Regularity and Green's relations for semigroups of transformations preserving orientation and an equivalence", Semigroup Forum **74**, pp.473–486.

5. PEI, H., DINGYN, Z. (2005) "Green's equivalences on semigroups of transformations preserving order and an equivalence relation", Semigroup Forum **71**, pp. 241–251.

6. ARAÚJO, J., KONIECZNY, J. (2004) "Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation and a Cross-Section", Communications in Algebra, **32**, pp. 1917-1935.

7. SUN, L. (2013) "A partial order on transformation semigroups that preserve double direction equivalence relation", Journal of Algebra and Its Applications **12** No.8.

8. PEI, H., ZHOU, H. (2011) "Abundant Semigroups of Transformations Preserving an Equivalence Relation", Algebra Colloquium **18**, No.01, pp. 77-82.

Received: 15.07.2017

УДК 519.21

Козаченко Ю.В.[1], *д.ф.-м.н., проф.*
Островський Є.[2], *проф.*
Сирота Л.[3], *проф.*

Зв'язки між розподілами експоненційних хвостів, моментами і генератрисою моментів для випадкових величин і векторів.

[1]Кафедра теорії ймовірностей, статистики та актуарної математики, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, м. Київ, Україна,
e - mails: yvk@univ.kiev.ua, ykoz@ukr.net
[2] Кафедра математики, Бар-Іланський університет, 59200, Рамат Ган, Ізраїль,
e-mail: eugostrovsky@list.ru
[3] Кафедра математики, Бар-Іланський університет, 59200, Рамат Ган, Ізраїль,
e - mail: sirota3@bezeqint.net

Kozachenko Yu.V.[1], *Dr.Sci., Prof.*,
Ostrovsky E.[2], *Prof.*,
Sirota L.[3], *Prof.*

Relations between exponential tails, moments and moment generating functions for random variables and vectors.

[1]Department of Probability Theory, Statistics and Actuarial Mathematics, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kiev, Ukraine,
e - mails: yvk@univ.kiev.ua, ykoz@ukr.net
[2] Department of Mathematics, Bar-Ilan University, 59200, Ramat Gan, Israel.
e-mail: eugostrovsky@list.ru
[3] Department of Mathematics, Bar-Ilan University, 59200, Ramat Gan, Israel.
e - mail: sirota3@bezeqint.net

We offer in this paper the non - asymptotical pairwise bilateral exact up to multiplicative constants interrelations between exponential decreasing tail behavior, moments (Grand Lebesgue Spaces) norm and moment generating functions norm for random variables and vectors (r.v.).

Key Words and Phrases: moment generating function (MGF) and norm, a tail of the distribution, ordinary and exponential moments, upper and lower non - asymptotical exponential estimates.

Mathematics Subject Classification (2000): primary 60G17; secondary 60E07; 60G70.

1 Definitions. Statement of problems. Previous results.

Let $(\Omega, F, \mathbf{P})$ be a probability space with non - trivial probability measure $\mathbf{P}$ and expectation $\mathbf{E}$, $\Omega = \{\omega\}$. Let also $\xi = \xi(\omega)$, $\xi : \Omega \to R$ be numerical valued random variable (r.v.), i.e. measurable function. The multivariate case may be considered further.

A. Tail functions.

This function $T_\xi(y),\ y \geqslant 0$ for the r.v. ξ is defined as ordinary by the formula

$$T_\xi(y) \stackrel{def}{=} \mathbf{P}(|\xi| \geqslant y),\ y \geqslant 0. \tag{1.1}$$

The properties of these functions are obvious.

Note that sometimes was used some modifications of these notion, for instance

$$\overline{T}_\xi(y) \stackrel{def}{=} \max[\mathbf{P}(\xi \geqslant y),\ \mathbf{P}(\xi \leqslant -y)],\ y \geqslant 0. \tag{1.1a}$$

It is clear

$$\overline{T}_\xi(y) \leqslant T_\xi(y) \leqslant 2\overline{T}_\xi(y).$$

B. Grand Lebesgue Spaces.

We recall first of all some needed facts about Grand Lebesgue Spaces (GLS).

Recently, see [22], [27], [29], [24], [34], [35], [36] etc. appear the so-called Grand Lebesque Spaces $GLS = G(\psi) = G(\psi; b),\ b = const \in (1, \infty]$ spaces consisting on all the random variables (measurable functions) $f : \Omega \to R$ with finite norms

$$||f||G(\psi) = G(\psi, b) \stackrel{def}{=} \sup_{p \in [1,b)} \left[\frac{|f|_p}{\psi(p)} \right]. \tag{1.2}$$

Here and in the sequel

$$|f|_p = [\mathbf{E}|f|^p]^{1/p} = \left[\int_\Omega |f(\omega)|^p\ \mathbf{P}(d\omega)\right]^{1/p};\ p \geqslant 1,$$

is the classical Lebesgue - Riesz $L(p)$ norm; and $\psi(\cdot)$ is some continuous positive on the semi - open interval $[1,b)$ function such that

$$\inf_{p\in[1,b)} \psi(p) > 0.$$

It is proved that $G(\psi;b)$ is Banach functional rearrangement invariant (r.i.) space and $supp(G(\psi_b)) := supp\psi_b = [1,b)$.

Let the *family* of measurable functions $h_\alpha = h_\alpha(x),\ x \in X,\ \alpha \in A$, where A be arbitrary set, be such that

$$\exists b \in (1,\infty],\ \forall p \in [1,b)\ \Rightarrow \psi^A(p) := \sup_{\alpha\in A} |\ h_\alpha\ |_p < \infty.$$

Such a function $\psi^A(p)$ is named as a *natural function* for the family A. Obviously,

$$\sup_{\alpha\in A} ||\ h_\alpha\ ||G\psi^A = 1.$$

Of course, the family A may consists on the unique function, say, $h = h(\omega)$, for which

$$\exists b > 1\ \forall p \in [1,b) \Rightarrow |h|_p < \infty.$$

These spaces are used, for example, in the theory of probability, theory of PDE, functional analysis, theory of Fourier series, theory of martingales etc.

C. About moment generating function (MGF).

We present here for beginning some known facts from the theory of one - dimensional random variables with exponential decreasing tails of distributions, see [28], [22], [27], chapters 1,2.

Especially we mention the authors preprint [29]; we offer in comparison with existing there results a more fine approach.

Let $\phi = \phi(\lambda), \lambda \in (-\lambda_0,\lambda_0),\ \lambda_0 = const \in (0,\infty]$ be certain even strong convex which takes positive values for positive arguments twice continuous differentiable function, briefly: Young - Orlicz function, such that

$$\phi(0) = \phi'(0) = 0,\ \phi''(0) > 0,\ \lim_{\lambda\to\lambda_0} \phi(\lambda)/\lambda = \infty. \tag{1.3}$$

For instance: $\phi(\lambda) = 0.5\lambda^2,\ \lambda_0 = \infty$; the so - called subgaussian case.

We denote the set of all these Young - Orlicz function as Φ; $\Phi = \{\phi(\cdot)\}$.

We say by definition that the *centered* random variable (r.v) $\xi = \xi(\omega)$ belongs to the space $B(\phi)$, if there exists certain non-negative constant $\tau \geqslant 0$ such that

$$\forall\lambda \in (-\lambda_0,\lambda_0)\ \Rightarrow \max_\pm \mathbf{E}\exp(\pm\lambda\xi) \leqslant \exp[\phi(\lambda\,\tau)]. \tag{1.4}$$

The minimal non - negative value τ satisfying (1.4) for all the values $\lambda \in (-\lambda_0,\lambda_0)$, is named a $B(\phi)$ norm of the variable ξ, write

$$||\xi||B(\phi) \stackrel{def}{=}$$

$$\inf\{\tau,\ \tau > 0:\ \forall\lambda:\ |\lambda| < \lambda_0\ \Rightarrow$$

$$\max_\pm \mathbf{E}\exp(\pm\lambda\xi) \leqslant \exp(\phi(\lambda\,\tau))\}. \tag{1.5}$$

These spaces are very convenient for the investigation of the r.v. having a exponential decreasing tail of distribution, for instance, for investigation of the limit theorem, the exponential bounds of distribution for sums of random variables, non-asymptotical properties, problem of continuous and weak compactness of random fields, study of Central Limit Theorem in the Banach space etc.

The space $B(\phi)$ with respect to the norm $||\cdot||B(\phi)$ and ordinary algebraic operations is a rearrangement invariant Banach space which is isomorphic to the subspace consisting on all the centered variables of Orlicz's space $(\Omega,F,\mathbf{P}),N(\cdot)$ with $N-$ function

$$N(u) = \exp(\phi^*(u)) - 1,\ \phi^*(u) = \sup_\lambda(\lambda u - \phi(\lambda)).$$

The transform $\phi \to \phi^*$ is called Young-Fenchel, or Legendre transform. The proof of considered assertion used the properties of saddle-point method and theorem of Fenchel-Moraux:

$$\phi^{**} = \phi.$$

Recall also the Young's inequality

$$\lambda u \leqslant \phi(\gamma u) + \phi^*(\lambda/\gamma),\ \gamma = const > 0.$$

Let $F = \{\xi(s)\},\ s \in S,\ S$ is an arbitrary set, be the family of somehow dependent mean zero random variables. The function $\phi(\cdot)$ may be "constructive" introduced by the formula

$$\phi(\lambda) = \phi_F(\lambda) \stackrel{def}{=} \max_{\pm} \ln \sup_{s \in S} \mathbf{E} \exp(\pm \lambda \xi(s)), \tag{1.6}$$

if obviously the family F of the centered r.v. $\{\xi(s),\ s \in S\}$ satisfies the so - called *uniform* Kramer's condition:

$$\exists \mu \in (0,\infty),\ \sup_{s \in S} T_{\xi(s)}(y) \leqslant \exp(-\mu\ y),\ y \geqslant 0.$$

In this case, i.e. in the case the choice the function $\phi(\cdot)$ by the formula (1.6), we will call the function $\phi(\lambda) = \phi_0(\lambda)$ as a *natural* function, and correspondingly the function

$$\lambda \to \mathbf{E} e^{\lambda \xi}$$

is named often as a moment generating function for the r.v. ξ, if of course there exists in some non - trivial neighborhood of origin.

Moreover, see [1], if $b = \infty$, then the following implication holds:

$$\lim_{\lambda \to \infty} \phi^{-1}(\log \mathbf{E} \exp(\lambda \xi))/\lambda = K \in (0,\infty)$$

if and only if

$$\lim_{x \to \infty} (\phi^*)^{-1}(|\log U(\xi,x)|)/x = 1/K.$$

The aim of this report is to establish the reciprocal non - asymptotic interrelations separately mutually possibly exact up to multiplicative constant between tail functions, moment generating functions, and Grand Lebesgue Spaces norms.

Throughout this paper, the letters $C, C_j(\cdot)$ will denote a various positive finite constants which may differ from one formula to the next even within a single string of estimates and which does not depend on the essentially variables p, x, λ, y etc.

We make no attempt to obtain the best values for these constants.

Obtained here results are unimprovable and generalized ones in [22], [27], chapter 4; [29], [30], [33].

The applications of these estimates appear for instance in the theory of (discontinuous, in general case) random fields and following in statistics, see, e.g. in [3], [4], [5], [16], chapter 11; [25], [43], [44], [48]; in the theory of Monte - Carlo method - in [14], [17].

2 Connection between tails and moments.

A. "Direct estimate". Given: the random variable ξ such that for some function $\psi(\cdot) \in \Psi = \Psi_\infty$ $||\xi|| = ||\xi|| G\psi \in (0,\infty)$. It is required to estimate the tail function $T_\xi(x)$, for sufficiently greatest values x, say $x > e$.

Define the auxiliary function

$$\nu(p) = \nu_\psi(p) := p \ln \psi(p),\ p \geqslant 1 \tag{2.1}$$

and correspondingly

$$\nu^*(z) = \nu^*_\psi(z) = \sup_{p \geqslant 1} \left(pz - \nu_\psi(p) \right),\ z \geqslant 0. \tag{2.2}$$

Theorem 2.1. Suppose $\xi \in G\psi,\ \xi \neq 0$. Our statement:

$$T_\xi(y) \leqslant \exp\{\ -\nu^*[\ \ln(y/||\xi||)\ ]\ \},\ y > e. \tag{2.3}$$

Proof. One can assume without loss of generality $||\xi|| G\psi = 1$. Then

$$|\xi|_p \leqslant \psi(p),\ p \in [1,\infty); \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{E}|\xi|^p \leqslant \psi^p(p), \tag{2.4}$$

and we apply the Markov - Tchebychev inequality

$$T_\xi(y) \leqslant \frac{\psi^p(p)}{y^p} =$$

$$\exp\left(-(p \ln y - p \ln \psi(p)\right) = \exp\left(-(p \ln y - \nu_\psi(p))\right).$$

It remains to take the minimum over $p \geqslant 1$ from the right - hand side of the inequality (2.4); $y \geqslant e$.

Remark 2.1. Let us define the following Young - Orlicz function

$$N(u) := \exp\{\ \nu^*[\ \ln|u|\ ]\ \},\ |u| \geqslant e,$$

and as usually

$$N(u) := C\ u^2,\ |u| < e,$$

where of course $C\ e^2 = \nu^*(1)$.

It is proved in [22], see also [30], [33], that if the function $\nu(p) = p\ \ln \psi(p),\ p \geqslant 1$ is continuous, convex, and such that $\lim_{\to\infty} \psi(p) = \infty$, then the Grand Lebesgue Space $G\psi$ coincides up to norm equivalence with Orlicz's space $L(N)$ builded over source probability space.

B. "Inverse estimate". Given:

$$T_\xi(x) \leqslant \exp(-\zeta(x)), \ x \geqslant 0, \ \zeta(x) \geqslant 0; \qquad (2.5)$$

and we denote $Z(y) = \zeta(\exp y), \ y \in R.$

Theorem 2.2. Suppose $Z(\cdot)$ is twice continuous differentiable convex function on certain interval (C, ∞) and suppose

$$\exists C_1 = const > 0 \ \Rightarrow C_2 := \inf_{y \geqslant C_1} Z''(y) > 0. \ (2.6)$$

Then

$$|\xi|_p \leqslant C_3 \exp\left(Z^*(p)/p\right), \qquad (2.7)$$

or equally

$$||\xi||G(Z^*(p)/p) \leqslant C_3 < \infty. \qquad (2.7a)$$

Proof. We have

$$\mathbf{E}|\xi|^p = p\int_0^\infty x^{p-1} T_\xi(x)dx \leqslant p\int_{-\infty}^\infty e^{py - Z(y)}dy =:$$

$$=: J(p). \qquad (2.8)$$

It follows from the saddle - point method that

$$J(p) \leqslant C_4^p \exp\left(\sup_y (py - Z(y))\right) = C_4^p \exp\left(Z^*(p)\right).$$

Let us represent a rigorous consideration. We deduce splitting the integral $J = J(p)$ onto two ones

$$J(p) = \ p\int_{-\infty}^{C_1} e^{py - Z(y)}dy + p\int_{C_1}^\infty e^{py - Z(y)}dy =$$

$$= J_1(p) + J_2(p).$$

Note first of all

$$J_1(p) \leqslant p\int_{-\infty}^{C_1} e^{py}dy \leqslant C_5^p, \ p \geqslant 1, \ 0 < C_5 < \infty.$$

Denote $S = S(p,y) = py - Z(y)$ and $y_0 = y_0(p) = argmax_{y \geqslant C_1} S(p,y)$; then

$$S(p,y) \leqslant \max_y S(p,y) - 0.5 S''_y(p,y)(y-y_0)^2 \leqslant$$

$$\leqslant Z^*(p) - C_6(y-y_0)^2,$$

therefore

$$J_2(p) \leqslant C_7 \ p \exp\left(Z^*(p)\right)$$

and following

$$J(p) \leqslant C_8^p \exp\left(Z^*(p)\right), \ p \geqslant 1.$$

We used the obvious estimate $p^{1/p} \leqslant C = e^{1/e}$.

This completes the proof of proposition 2.2.

C. Coincidence.

It is convenient for us to rewrite the restriction (2.4) in the following form

$$|\xi|_p \leqslant p \ e^{\ -\nu(p)/p} \ , \ p \geqslant 1, \qquad (2.9)$$

i.e. in (2.4)

$$\psi(p) := \psi_\nu(p) = \ e^{-\nu(p)/p}. \qquad (2.10)$$

Theorem 2.3. Suppose that the function $\nu = \nu(p), \ p \geqslant 1$ in (2.9) is continuous, convex, and such that the function $y \to \nu(\exp y)$ satisfies the condition (2.6). Then the GLS norm estimate for the non - zero r.v. ξ of the form

$$|\xi|_p \leqslant C_1 \ p \ e^{\ -\nu(p)/p} \ , \ p \geqslant 1, \qquad (2.11)$$

is quite equivalent to the following tail inequality

$$T_\xi(y) \leqslant \exp\left(-\nu^*(\ln(y/C_2)\right), \ C_2 = const \in (0,\infty),$$

$$y \geqslant C_2 e. \qquad (2.12)$$

Proof. The implication (2.11) $\to$ (2.12) contains really in the statement of theorem 2.1. Conversely, let (2.12) there holds. It follows from theorem 2.2 that the r.v. ξ belongs to the space $G\psi_\nu, \ \xi \in G(\psi_\nu)$, where

$$\psi_\nu(p) = \exp\left(\nu^{**}(p)/p\right), \ p \geqslant 1.$$

But $\nu^{**} = \nu$ by virtue of theorem of Fenchel - Moraux, therefore $\xi \in G(\psi)$.

This completes the proof of theorem 2.3.

3 Relations between tails and moments generating functions.

A. "Direct estimate". Given as above, see (2.5), for the *centered* r.v. ξ

$$T_\xi(x) \leqslant \exp(-\zeta(x)), \ x \geqslant 0.$$

It is required to estimate for the sufficiently greatest values λ, say, $\lambda > e$, the moment generating function (MGF) for the r.v. ξ :

$$g_\xi(\lambda) \stackrel{def}{=} \mathbf{E} e^{\lambda \xi}, \ \lambda = const \in R, \tag{3.1}$$

or equally the $B(\phi)$ norm of the r.v. ξ for suitable function $\phi(\cdot) \in \Phi$.

The alternative case $\lambda \in (-e, e)$ was considered in [27], chapter 1, section 1.2. Note that we represent here a new approach.

We must investigate previously one interest integral. Namely, let (X, M, μ) be non - trivial measurable space with non - trivial sigma finite measure μ. We assume at once $\mu(X) = \infty$, as long as the opposite case is trivial for us.

We intend to estimate for "greatest"values of real parameter $\lambda, \ \lambda > e$ the following integral

$$I(\lambda) := \int_X e^{\lambda x - \zeta(x)} \mu(dx) = \int e^{\lambda x - \zeta(x)} \mu(dx), \tag{3.2}$$

assuming of course its convergence for all the sufficiently great values λ, say $\lambda > e$.

Here $\zeta = \zeta(x)$ is non - negative measurable function, not necessary to be convex.

If in contradiction the measure μ is finite: $\mu(X) = M \in (0, \infty)$; then the integral $I(\lambda)$ allows a simple estimate

$$I(\lambda) \leqslant M \cdot \sup_{x \in X} \left\{ e^{\lambda x - \zeta(x)} \right\} = M \cdot e^{\zeta^*(x)}. \tag{3.2a}$$

Let now $\mu(X) = \infty$ and $\epsilon = const \in (0,1)$; let us introduce the following integral

$$K(\epsilon) := \int_X e^{-\epsilon \ \zeta(x)} \ \mu(dx). \tag{3.3}$$

It will be presumed its finiteness for all the positive values $\epsilon > 0$; or at last for *some* positive value $\epsilon_0 \in (0,1)$; then $\forall \epsilon \geqslant \epsilon_0 \ \Rightarrow K(\epsilon) < \infty$.

Then the following measures are probabilistic:

$$\nu_\epsilon(dx) := \frac{e^{-\epsilon \ \zeta(x)}}{K(\epsilon)} \mu(dx) :$$

$$\int_X \nu_\epsilon(dx) = 1, 0 < \epsilon < 1. \tag{3.4}$$

We have

$$\frac{I(\lambda)}{K(\epsilon)} = \int \exp(\lambda x - (1-\epsilon) \ \zeta(x)) \ \nu_\epsilon(dx) \leqslant$$

$$\exp\left\{ \sup_{x \in X} [\lambda x - (1-\epsilon) \ \zeta(x)] \right\} =$$

$$= \exp\left\{ (1-\epsilon) \sup_x \left[\frac{\lambda}{1-\epsilon} \ x - \zeta(x) \right] \right\} =$$

$$\exp\left\{ (1-\epsilon) \ \zeta^*\left(\frac{\lambda}{1-\epsilon} \right) \right\}.$$

Following,

$$I(\lambda) \leqslant K(\epsilon) \ \exp\left\{ (1-\epsilon) \ \zeta^*\left(\frac{\lambda}{1-\epsilon} \right) \right\} \tag{3.5}$$

and hence:

Lemma 3.1 We assert under formulated here conditions:

$$I(\lambda) \leqslant \inf_{\epsilon \in (0,1)} \left[K(\epsilon) \ \exp\left\{ (1-\epsilon) \ \zeta^*\left(\frac{\lambda}{1-\epsilon} \right) \right\} \right]. \tag{3.6}$$

We intend to simplify the last estimate under some simple additional conditions. In order to carry out this, we define the function

$$\theta(\lambda) \stackrel{def}{=} \frac{C_1}{\lambda \ \zeta^{*\prime}(\lambda)} \tag{3.7}$$

for the greatest values $\lambda : \ \lambda > \lambda_0$, where $\lambda_0, \ \lambda_0 = const, \ \theta(\lambda_0) \leqslant 0.5$ (say).

There is a reasonable to choose in (3.5), (3.6) $\epsilon := \theta(\lambda)$, see [27], chapter 3, pp. 99 - 110. We conclude denoting

$$\overline{K}(\lambda) := \int_X e^{-\theta(\lambda) \ \zeta^*(x)} \mu(dx) = K(\theta(\lambda)) :$$

$$I(\lambda) \leqslant C_2 \ \overline{K}(\lambda) \ \exp\left(\zeta^*(\lambda)\right). \tag{3.8}$$

Definition 3.1. We will say that the function $\zeta = \zeta(x)$ is regular, iff

$$\exists C_3 = const < \infty, \ \forall \lambda > \lambda_0 \ \Rightarrow \overline{K}(\lambda) \leqslant \exp \zeta^*(C_3 \lambda). \tag{3.9}$$

It follows immediately from lemma 3.1

Lemma 3.2. We assert under formulated here conditions and under the condition of regularity (3.9)

$$\exists C_4 = const = C_4(\zeta) < \infty \ \Rightarrow I(\lambda) \leqslant \exp \zeta^*(C_4 \lambda),$$

$$|\lambda| > \lambda_0. \tag{3.10}$$

We return to the formulated above problem "A". Indeed, let the estimate (2.5) be a given. Let us estimate the MGF function

$$g_\xi(\lambda) = \mathbf{E} e^{\lambda \xi}, \ \lambda \geqslant e.$$

The case $|\lambda| \leqslant e$ may by simple investigated by Taylor's formula.

Theorem 3.1. Suppose $\mathbf{E}\xi = 0$ and that in the estimate (2.5) the function $\zeta = \zeta(x)$ satisfies all the conditions of the lemma 3.2, relative the ordinary Lebesgue measure $\mu(dx) = dx$ and $X = R$, in particular the condition of regularity. We propose

$$g_\xi(\lambda) = \mathbf{E} e^{\lambda\xi} \leqslant \exp\left(\ \zeta^*(C\lambda) \ \right), \ \exists C < \infty, \tag{3.11}$$

or equally

$$|| \ \xi \ || G\zeta^* = C < \infty. \tag{3.11a}$$

Proof. Suppose $\xi \neq 0$ and $\lambda \geqslant e$; the case $|\lambda| \leqslant e$ may by simple investigated by the Taylor's formula taking into account the equality $\mathbf{E}\xi = 0$ and the case $\lambda \leqslant -e$ is complete symmetric to the case $\lambda \geqslant e$.

We have through integration "by parts see for details [22],

$$g_\xi(\lambda) \leqslant 1 + 2\lambda \int_0^\infty \exp(\lambda x - \zeta(x)) \ dx.$$

We use the statement of the lemma 3.2:

$$\int_0^\infty \exp(\lambda x - \zeta(x)) \leqslant \exp \zeta^*(\ C_1 \ \lambda), \ \lambda \geqslant e.$$

The estimate of the form

$$1 + 2\lambda \exp \zeta^*(\ C_1 \ \lambda) \leqslant \exp \zeta^*(\ C_2 \ \lambda \ ),$$

$$C_2 = const \in (C_1, \infty), \ |\lambda| \geqslant e,$$

is proved in particular in the book [27], chapter 1, page 25.

B. "Inverse estimate". Given: for the centered r.v. ξ the inequality of the form

$$\mathbf{E} e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\kappa(\lambda)}, \ \lambda \in R, \tag{3.12}$$

where $\kappa(\cdot)$ is some finite on the whole axis R even non - negative function. Let for beginning $x > 0$; we apply the famous Chernov's estimate, which follows in turn immediately from the Tchebychev - Markov inequality:

$$\mathbf{P}(\xi \geqslant x) \leqslant \frac{e^{\kappa(\lambda)}}{e^{\lambda x}} = e^{-(\lambda x - \kappa(\lambda))}, \ \lambda > 0,$$

therefore

$$\mathbf{P}(\xi > x) \leqslant e^{-\sup_{\lambda > 0}(\lambda x - \kappa(\lambda))} = e^{-\kappa^*(x)}, \tag{3.13}$$

and likewise estimate there holds for the "associate"probability $\mathbf{P}(\xi \leqslant -x), \ x > 0$. Thus, we deduce under the conditions of the pilcrow **B**

Theorem 3.2.

$$T_\xi(x) \leqslant e^{-\kappa^*(x)}, \ x > 0. \tag{3.14}$$

Remark 3.1. In the article [15] is builded an example of the $\phi(\cdot)$ function from the set Φ and the r.v. η from the space $B(\phi)$ with unit norm: $|| \ \eta \ || B(\phi) = 1$, but for which there exists a deterministic sequence $\{x(n)\}, \ n = 1, 2, \ldots$ tending to infinity with the following property:

$$\exists C = const \in (0, \infty), \ \Rightarrow T_\eta(x(n)) \geqslant$$

$$\geqslant C \ \exp(-\phi^*(x(n)).$$

Evidently, the r.v. η is not Gaussian distributed still in the case when $\phi(\lambda) = 0.5 \ \lambda^2, \ \lambda \in R$.

C. Coincidence.

Theorem 3.3. Suppose that for the certain centered non - zero r.v. ξ there holds the inequality of the form

$$\mathbf{E} e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\kappa(\lambda)}, \ \lambda \in R, \tag{3.15}$$

or equally

$$|| \ \xi \ || B(\kappa) \leqslant 1,$$

where $\kappa(\cdot)$ is some finite on the whole axis R even non - negative continuous convex function such that

$$\kappa(0) = 0, \ \lim_{\lambda \to \infty} \kappa(\lambda)/\lambda = \infty. \tag{3.16}$$

We assert that the equality (3.15) is quite equivalent to the following tail estimate

$$\exists K \in (0, \infty) \ \Rightarrow T_\xi(x) \leqslant \exp\left(-\kappa^*(x/K)\right), \ x \geqslant 0, \tag{3.17}$$

and herewith

$$C_1 K \leqslant ||\xi|| B(\kappa) \leqslant C_2 K. \tag{3.18}$$

Proof. The implication (3.15) $\to$ (3.17) with $K=1$ contains in (3.14). Conversely, let (3.17) be satisfied; one can take $K=1$.

It follows from theorem 3.1 that the random variable. ξ belongs to the space $B(\kappa^{**})$: $\xi \in B(\kappa^{**})$. But $\kappa^{**} = \kappa$ by virtue of theorem of Fenchel - Moraux, therefore $\xi \in B(\kappa)$.

The other details may be omitted.

4 Interrelation between moment generating function and ordinary moments.

A. "Direct estimate". Given: the (centered) r.v. ξ belongs to the certain space $B(\phi)$, $\phi \in \Phi$:

$$\mathbf{E}e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\ \phi(\lambda||\xi||)}, \quad ||\xi|| = ||\xi||B(\phi). \tag{4.1}$$

It is required to estimate the GLS norm $||\xi||G\psi$ for suitable $\psi-$ function.

One can take in (4.1) without loss of generality $||\xi|| = ||\xi||B(\phi) = 1$, so that

$$\mathbf{E}e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\ \phi(\lambda)}, \ \lambda \in R. \tag{4.1a}$$

Define the function

$$\beta_\phi(y) = \beta(y) := \phi\left(e^y\right), \ y \in R. \tag{4.2}$$

We have using an elementary inequality

$$z^p \leqslant \left(\frac{p}{e}\right)^p \cdot e^z, \ z>0, \ p \geqslant 1 :$$

$$\mathbf{E}|\xi|^p \leqslant \left(\frac{p}{e\lambda}\right)^p e^{\phi(\lambda)}, \ \lambda > 0,$$

therefore

$$\mathbf{E}|\xi|^p \leqslant \left(\frac{p}{e}\right)^p \cdot \inf_{\lambda>1}\left[e^{-p\ln\lambda + \phi(\lambda)}\right] =$$

$$= \left(\frac{p}{e}\right)^p \cdot \exp\left(-\sup_{\lambda>1}(p\ln\lambda - \phi(\lambda)\right) =$$

$$\left(\frac{p}{e}\right)^p \cdot \exp\left(-\sup_{\mu>0}(p\mu - \beta(\mu)\right) =$$

$$= \left(\frac{p}{e}\right)^p \cdot \exp(-\beta^*(p)),$$

Result:

Theorem 4.1. Denote

$$\psi_{(\phi)}(p) = p \cdot \exp\left[-\beta^*(p)/p\right], \ p \geqslant 1; \tag{4.3}$$

then we have under formulated before conditions and notations

$$||\ \xi\ ||G\psi_{(\phi)} \leqslant e^{-1}\ ||\ \xi\ ||B(\phi). \tag{4.4}$$

B. "Inverse estimate". Given: the non - zero (centered) r.v. ξ belongs to the certain space $G(\psi)$, $\psi \in \Psi$: $||\xi||G\psi \in (0,\infty)$. We need to estimate the MGF function for the r.v. ξ.

We can and will suppose $||\xi||G\psi = 1$, therefore

$$|\xi|_p \leqslant \psi(p), \ p \geqslant 1. \tag{4.5}$$

It is convenient for us to rewrite the restriction (4.5) in the following form

$$|\xi|_p \leqslant p\ e^{-\Delta(p)/p}, \ p \geqslant 1, \tag{4.5a}$$

i.e. in (4.5)

$$\psi(p) := \psi_\Delta(p) = p\ e^{-\Delta(p)/p}. \tag{4.5b}$$

The concrete conditions on the function $\Delta(\cdot)$ will be clarified below.

Note that the condition

$$\lim_{p\to\infty}[\psi(p)/p] = 0$$

is necessary for the existence of all the exponential moments of the r.v. ξ, on the other hands, for the existence of MGF for r.v. ξ.

It is enough to use the inequality (4.5) only for the even number $p : p = 2m, \ m = 0,1,2,\ldots$:

$$\mathbf{E}\xi^{2m} \leqslant \psi^{2m}(2m) = (2m)^{2m}\exp(-\Delta(2m)).$$

We have for the great values λ, say for $\lambda \geqslant e$, using the Stirling's formula

$$\mathbf{E}\cosh(\lambda\xi) - 1 = \sum_{m=1}^\infty \frac{\lambda^{2m}}{(2m)!}\mathbf{E}\xi^{2m} \leqslant$$

$$\sum_{k=2,4,\ldots} \exp(k\ln(C\lambda) - \Delta(k)). \tag{4.6}$$

Let $\epsilon = const \in (0,1)$; we apply the Young's inequality, denoting $\mu = \ln(C\lambda)$:

$$k\mu \leqslant \Delta(\epsilon k) + \Delta^*(\mu/\epsilon)$$

and denoting

$$\sigma_\Delta(\epsilon) = \sigma(\epsilon) := \sum_{k=2,4,\ldots} e^{\Delta(\epsilon k) - \Delta(k)} : \tag{4.7}$$

$$\mathbf{E}\cosh(\lambda\xi) - 1 \leqslant e^{\Delta^*(\mu/\epsilon)} \sum_{k=2,4,\ldots} e^{\Delta(\epsilon k) - \Delta(k)} \leqslant$$

$$\sigma_\Delta(\epsilon) \cdot e^{\Delta^*(\mu/\epsilon)}. \tag{4.8}$$

Introduce also the function $\Delta_1^*(\mu)$ as follows:

$$\Delta_1^*(\mu) := \inf_{\epsilon\in(0,1)} \ln\{\sigma(\epsilon)\ \exp(\Delta^*(\mu/\epsilon))\}\,; \quad (4.9)$$

then we obtain for the values $\lambda \geqslant e$:

$$\mathbf{E}e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\Delta_1^*(\ln(C_2\lambda))}. \quad (4.10)$$

At the same estimate is true also with another but again finite constant C_3 for the values $|\lambda| < e$ and $\lambda \leqslant -e$, following

$$\exists C_3 < \infty \ \Rightarrow \mathbf{E}e^{\lambda\xi} \leqslant e^{\Delta_1^*(\ln(C_3\ |\lambda)|)}. \quad (4.11)$$

Let us impose the following important condition (Δ) on the source function $\phi_\Delta(\cdot)$:

$$(\Delta): \quad \exists C_4 \in [1,\infty) \Rightarrow \Delta_1^*(\ln(\ |\lambda)|) \leqslant$$

$$\leqslant \Delta^*(\ln(\ |C_4\lambda)|),\ \lambda \in R. \quad (4.12)$$

Theorem 4.2. Suppose the function $\psi = \psi_\Delta$ in (4.5a), (4.5b) satisfies the condition (Δ) (4.12). Define the following function

$$\phi_\Delta(\lambda) = \Delta^*(\ln|\lambda|),\ \lambda \in R. \quad (4.13)$$

Our proposition:

$$||\ \xi\ ||B\,(\phi_\Delta) \leqslant C_4\ ||\ \xi\ ||G\psi_\Delta. \quad (4.14)$$

C. Coincidence.

Theorem 4.3. Let the initial function ϕ from the set Φ be such that the correspondent function $\Delta_\phi := \beta_\phi^*$ satisfies the condition (Δ). Then both the norms $||\ \xi\ ||B(\phi)$ and $||\ \xi\ ||G\psi_\phi$ are equivalent:

$$||\ \xi\ ||B(\phi) \leqslant C_4\ ||\ \xi\ ||G\psi_\phi \leqslant C_5||\ \xi\ ||B(\phi). \quad (4.15)$$

5 Some examples and counterexamples.

Example 1.

Let $L = L(\lambda)$ be positive twice continuous differentiable slowly varying at infinity regular in the following sense

$$\lim_{\lambda\to\infty} \left\{ \frac{L(\lambda/L(\lambda))}{L(\lambda)} \right\} = 1$$

function. Define also for sufficiently greatest values λ, say for $|\lambda| \geqslant e$, the $\Phi -$ function $\phi_{m,L} = \phi_{m,L}(\lambda),\ m = const \in (1,\infty)$ of the form

$$\phi_{m,L}(\lambda) \stackrel{def}{=} m^{-1}\ |\lambda|^m\ L^{1/q}(|\lambda|^m),\ q = m/(m-1),$$

and as usually

$$\phi_{m,L}(\lambda) \stackrel{def}{=} C_{m,L}\ \lambda^2,\ |\lambda| \leqslant 1. \quad (5.1)$$

The correspondent $B(\phi)$ space will be denoted by $B_{m,L} := B(\phi_{m,L})$.

Define also the following $\psi -$ function

$$\psi_{m,L}(p) = p^{1/m} L^{-1/(m-1)} \left(\ p^{(m-1)^2/m}\ \right),\ p \geqslant 1. \quad (5.2)$$

Let ξ be non - zero centered: $\mathbf{E}\xi = 0$ r.v. We conclude by virtue of theorem 3.3 that the including $\xi \in B_{m,L}$, i.e. the inequality

$$\exists C_1 \in (0,\infty),\ \forall \lambda \in R\ \Rightarrow \mathbf{E}\exp\lambda\xi \leqslant$$

$$\leqslant \exp(\phi_{m,L}(C_1\ \lambda))\,,\ 0 < C_1 < \infty, \quad (5.3a)$$

or equally

$$||\ \xi\ ||B\phi_{m,L} \leqslant C_1 < \infty,$$

is quite equivalent to the following tail estimate

$$\exists C_2 \in (0,1),\ \forall y \geqslant e\ \Rightarrow$$

$$T_\xi(y) \leqslant \exp\left\{ -C_2\ q^{-1}\ y^q\ L^{-(q-1)}\ \left(y^{q-1}\ \right) \right\},$$

$$q = m/(m-1), \quad (5.3b)$$

or in turn is equivalent to the Grand Lebesgue Space norm estimate

$$||\ \xi\ ||G\psi_{m,L} = C < \infty. \quad (5.3c)$$

It is sufficient to verify this statement to mention the book [47], pp. 32 - 33, where is in particular calculated the Young - Fenchel transform for the function $\phi_{m,L}(\lambda)$.

Let us consider the case when in addition

$$L(\lambda) = L_r(\lambda) = [\ln\ |\lambda|]^r,\ \lambda \geqslant e,\ r = const \in R.$$

The correspondent $\phi -$ function will be denoted by $\phi_{m,r}(\lambda)$:

$$\phi_{m,r}(\lambda) = |\lambda|^m\ (\ln|\lambda|)^r,\ |\lambda| \geqslant e,$$

and the correspondent $\psi(p) = \psi_{m,r}(p) -$ function has a form

$$\psi_{m,r}(p) = p^{1/m}\ \ln^{-r/(m-1)}(p+1),\ p \geqslant 1. \quad (5.4)$$

Introduce also the following tail function

$$T^{(m,r)}(x) = \exp\left\{ -x^q \, (\ln x)^{-(q-1)r} \right\}, \ x \geqslant e. \tag{5.5}$$

The following propositions for the non - zero centered r.v. ξ are equivalent:

$$\mathbf{A}. \quad ||\ \xi\ ||G\psi_{m,r} < \infty; \tag{5.6}$$

$$\mathbf{B}. \quad ||\xi||B(\phi_{m,r}) < \infty; \tag{5.7}$$

$$\mathbf{C}. \quad \exists K = const \in (0,\infty) \Rightarrow$$

$$T_\xi(x) \leqslant T^{(m,r)}(x/K); \tag{5.8}$$

and herewith both the norms $||\ \xi\ ||G\psi_{m,r}$, $|\xi||B(\phi_{m,r})$ and the "Tail constant"K are equivalent:

$$K \leqslant C_1 \ ||\ \xi\ ||G\psi_{m,r} \leqslant C_2||\ \xi\ ||B(\phi_{m,r}) \leqslant C_3 K, \tag{5.8}$$

if we understood as the capacity of the value K its maximal value.

The last statement generalized ones obtained in [22], [25], [27], section 1, pp. 22 - 26; [30], [40], [41] etc.

Example 2.

Another example: define the other Grand Lebesgue Space space of random variables $\Psi(C,\beta)$, $\beta = const > 0$ which consist on all the random variables $\{\eta\}$ with finite norm ($C \in (0,\infty)$)

$$|||\eta|||_{C,\beta} \stackrel{def}{=} \sup_{p\geqslant 1} \left[\ |\eta|_p \exp\left(-C \ p^\beta\right) \ \right].$$

It is easy to verify that $\eta \in \cup_{C>0}\Psi(C,\beta), \eta \ne 0 \Leftrightarrow$

$$T_\eta(x) \leqslant \exp\left(-C_1(C,\beta)(\log(1+x))^{1+1/\beta}\right), \ x \geqslant 0.$$

Note that in this case the MGF for arbitrary r.v. with

$$T_{\eta,x} \geqslant \exp\left(-C_1(C,\beta)(\log(1+x))^{1+1/\beta}\right).$$

does not exists; on the other words this variable does not satisfy the Kramer's condition.

Let us represent more exact conclusions. Define as ordinary for every constant $\theta > 1$

$$\theta' \stackrel{def}{=} \frac{\theta}{\theta - 1}.$$

Obviously, $(\theta')' = \theta$.

Suppose for certain r.v. η

$$\ln T_\eta(y) \leqslant C_1 - \frac{\ln^\theta y}{\theta}, \ y \geqslant e, \tag{5.9}$$

then

$$\ln |\eta|_p \leqslant C_2(C_1,\beta) + \frac{p^{\theta'}}{\theta'}, \ p \geqslant 1, \tag{5.10}$$

and conversely, the relation (5.9) follows in turn from (5.10).

Moreover, the following "Tauberian"conclusion holds true, see [1]. The following propositions are completely equivalent:

$$\lim_{y\to\infty} \left[\{ \ |\ln T_\eta(y)| \ \} : \left\{ \frac{\ln^\theta y}{\theta} \right\} \right] = 1, \tag{5.11}$$

$$\lim_{p\to\infty} \left[\{ \ \ln |\eta|_p \ \} : \left\{ \ \frac{p^{\theta'}}{\theta'} \ \right\} \right] = 1. \tag{5.12}$$

Counterexample 1.

Let $(\Omega, F, \mathbf{P})$ be the classical probability space $((0,1), F, \mu)$, where $\mu(d\omega) = d\omega$ is ordinary Lebesgue measure. Let also $\alpha = const \in (0,1/2)$; $p_0 := 1/\alpha > 2$.

We consider here the random variable

$$\xi(\omega) := \omega^{-\alpha}.$$

We have:

$$\psi_\xi(p) = |\xi|_p = (1-\alpha p)^{-1/p} \asymp (p_0 - p)^{-\alpha}, \ p \in [1, p_0),$$

$$\psi_\xi(p) = +\infty, \ p \geqslant p_0;$$

$$T_\xi(y) = y^{-1/\alpha}, \ y \in (0,1);$$

$$\nu_\xi(p) \asymp |\ln(p_0 - p)|, \ p \in [1, p_0);$$

$$\nu^*(\ln y) \asymp -1 + p_0 \ln y - \ln\ln y, \ y > e^e.$$

Theorem 2.1, more precisely, the inequality (2.3) gives us the following estimate

$$T_\xi(y) \leqslant C(\alpha) \ y^{-1/\alpha} \ \ln y, \ y \geqslant e,$$

which is "essentially"greatest as $y \to \infty$ than the exact value of this tail function $T_\xi(y)$.

The reason for this phenomenon is that here $\psi_\xi(\cdot) \in G\psi_b$, where the value b is finite: $b = p_0 = 1/\alpha < \infty$, in contradiction to the conditions of theorem 2.1.

Many other interest examples about this relations may be found in [35].

Counterexample 2.

Let ξ be symmetrical distributed r.v. having the Laplace distribution with the density

$$f_\xi(x) = f(x) = 0.5\ e^{-|x|},\ x \in R.$$

It is easily to calculate:

$$\psi_\xi(p) = |\xi|_p \asymp p,\ 1 \leqslant p < \infty,$$

$$\mathbf{E} e^{\lambda\ \xi} = \frac{1}{1-\lambda^2},\ |\lambda| < 1,$$

so that

$$\phi_\xi(\lambda) = -\ln(1-\lambda^2), \quad |\lambda| < 1,$$

and

$$\phi_\xi(\lambda) = +\infty$$

otherwise;

$$T_\xi(y) = e^{-y},\ y \geqslant 0.$$

The applying of theorem 2.1 gives the estimate

$$T_\xi(y) = e^{-y/C},\ y \geqslant Ce,\ C = const > 1;$$

i.e. despite that in this case again $b = 1 < \infty$, the proposition of theorem 2.1 remains true.

6 Multivariate case.

The theory of the multidimensional $B(\phi)$, $G\psi$ spaces and the spaces of random vectors with exponential decreasing tail if distribution is described in the recent article [30]; it is quite analogous to the explained one. We represent further briefly in this section some generalizations of previous results into the case when the instead the random variable stands a *random vector,* which is abbreviated also by r.v.

"Briefly in the case when the multidimensional version is completely alike to the one - dimensional one.

In detail, denote by $\epsilon = \vec{\epsilon} = (\epsilon(1), \epsilon(2), \ldots, \epsilon(d))$ the non - random $d-$ dimensional numerical vector, $d = 2, 3, \ldots$, whose components take the values ± 1 only. Set in particular $\vec{1} = (1, 1, \ldots, 1) \in R^d_+$.

Denote also by $\Theta = \Theta(d) = \{\ \vec{\epsilon}\ \}$ *collection* of all such a vectors. Note that $card\Theta = 2^d$ and $\vec{1} \in \Theta$.

Another notations. For $\vec{\epsilon} \in \Theta(d)$ and vector $\vec{x}$ we introduce the coordinatewise tensor product as a $d-$ dimensional vector of the form

$$\vec{\epsilon} \otimes \vec{x} \stackrel{def}{=} (\epsilon(1)\ x(1),\ \epsilon(2)\ x(2),\ \ldots, \epsilon(d)\ x(d)),$$

and analogously may be defined recursively the triple tensor product

$$\vec{\epsilon} \otimes \vec{x} \otimes \vec{y} = (\vec{\epsilon} \otimes \vec{x}) \otimes \vec{y} =$$

$$(\epsilon(1)\, x(1)\, y(1),\ \epsilon(2)\, x(2)\, y(2),\ \ldots, \epsilon(d)\, x(d)\, y(d)).$$

Definition 6.1.

Let $\xi = \vec{\xi} = (\xi(1), \xi(2), \ldots, \xi(d))$ be a centered random vector such that each its component $\xi(j)$ satisfies the Kramer's condition. The *natural function* $\phi_\xi = \phi_\xi(\lambda)$, $\lambda = \vec{\lambda} = (\lambda(1), \lambda(2), \ldots, \lambda(d)) \in R^d$ for the random vector ξ is defined as follows:

$$\exp\{\phi_\xi(\lambda)\} \stackrel{def}{=} \max_{\vec{\epsilon} \in \Theta}\ \mathbf{E} \exp\left\{\sum_{j=1}^d \epsilon(j)\lambda(j)\xi(j)\right\} =$$

$$\max_{\vec{\epsilon} \in \Theta}\ \mathbf{E} \exp\{\epsilon(1)\lambda(1)\xi(1) + \epsilon(2)\lambda(2)\xi(2) + \ldots +$$

$$+\epsilon(d)\lambda(d)\xi(d)\} = \max_{\vec{\epsilon} \in \Theta}\ \mathbf{E} \exp(\vec{\epsilon} \otimes \vec{\lambda} \otimes \vec{\xi}). \quad (6.1)$$

where " max " is calculated over all the combinations of signs $\epsilon(j) = \pm 1$.

Definition 6.2.

The *tail function* for the random vector $\vec{\xi}$ $U(\vec{\xi}, \vec{x})$, $\vec{x} = (x(1), x(2), \ldots, x(d))$, where all the coordinates $x(j)$ of the deterministic vector $\vec{x}$ are non - negative, is defined as follows.

$$U(\vec{\xi}, \vec{x}) \stackrel{def}{=} \max_{\vec{\epsilon} \in \Theta} \mathbf{P}\left(\cap_{j=1}^d \{\epsilon(j)\xi(j) > x(j)\}\right) =$$

$$\max_{\vec{\epsilon} \in \Theta} \mathbf{P}(\epsilon(1)\xi(1) > x(1),\ \epsilon(2)\xi(2) >$$

$$> x(2),\ \ldots,\ \epsilon(d)\xi(d) > x(d)), \qquad (6.2)$$

where as before " max " is calculated over all the combinations of signs $\epsilon(j) = \pm 1$.

We illustrate this notion in the case $d = 2$. Let $\vec{\xi} = (\xi(1),\ \xi(2))$ be a two - dimensional random vector and let x, y be non - negative numbers. Then for all the non - negative values x, y

$$U((\xi(1), \xi(2)),\ (x, y)) =$$

$$\max[\mathbf{P}(\xi(1) > x,\ \xi(2) > y),\ \mathbf{P}(\xi(1) > x,\ \xi(2) < -y),$$

$$\mathbf{P}(\xi(1) < -x,\ \xi(2) > y),\ \mathbf{P}(\xi(1) < -x,\ \xi(2) < -y)].$$

Definition 6.3.

Let $h = h(x), \ x \in R^d$ be some non - negative real valued function, which is finite on some non - empty neighborhood of origin. We denote as ordinary

$$suppх = \{x, \ h(x) < \infty\}.$$

The Young - Fenchel, or Legendre transform $h^*(y), \ y \in R^d$ is defined likewise the one - dimensional case

$$h^*(y) \stackrel{def}{=} \sup_{x \in supph} ((x, y) - h(x)). \tag{6.3}$$

Herewith (x, y) denotes the scalar product of the vectors $x, y: \ (x, y) = \sum_j x(j)y(j); \ |x| = \sqrt{(x, x)}$.

Obviously, if the set *supph* is central symmetric, then the function $h^*(y)$ is even.

Definition 6.4.

Recall, see [23], [45], [46] that the function $x \to g(x), \ x \in R^d, \ g(x) \in R^1_+$ is named multivariate Young, or Young - Orlicz function, if it is even, $d-$ times continuous differentiable, convex, non - negative, finite on the whole space R^d, and such that

$$g(x) = 0 \ \Leftrightarrow x = 0; \quad \frac{\partial g}{\partial x} / (\vec{x} = 0) = 0,$$

$$\det \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} / (\vec{x} = 0) > 0. \tag{6.4}$$

We explain in detail:

$$\frac{\partial g}{\partial x} = \left\{ \frac{\partial g}{\partial x_j} \right\} = gradg, \quad \frac{\partial^2 g}{\partial x^2} = \left\{ \frac{\partial^2 g}{\partial x_k \partial x_l} \right\}, \ -$$

be a Hess matrix, $i, k, l = 1, 2, \ldots, d$.

We assume finally

$$\lim_{|x| \to \infty} \frac{\partial^d g}{\prod_{k=1}^d \partial x_k} = \infty.$$

We will denote the set of all such a functions by $Y = Y(R^d)$ and denote also by D introduced before matrix

$$D = D_g := \frac{1}{2} \left\{ \frac{\partial^2 g(0)}{\partial x_k \partial x_l} \right\}.$$

Evidently, the matrix $D = D_g$ is non - negative definite, write $D = D_g \geqslant\geqslant 0$.

Definition 6.5

Let the function $\phi = \phi(\lambda), \ \lambda \in R^d$ be the Young function. We will say by definition likewise the one - dimensional case that the *centered* (mean zero) random vector (r.v) $\xi = \xi(\omega) = \vec{\xi} = (\xi(1), \xi(2), \ldots, \xi(d))$ with values in the space R^d belongs to the space $B(\phi)$, write $\xi = \vec{\xi} \in B(\phi)$, if there exists certain non-negative constant $\tau \geqslant 0$ such that

$$\forall \lambda \in R^d \ \Rightarrow \max_{\vec{\epsilon}} \mathbf{E} \exp \left(\sum_{j=1}^d \epsilon(j)\lambda(j)\xi(j) \right) \leqslant$$

$$\leqslant \exp[\phi(\lambda \cdot \tau)]. \tag{6.6}$$

The minimal value τ satisfying (6.6) for all the values $\lambda \in R^d$, is named by definition as a $B(\phi)$ norm of the vector ξ, write

$$||\xi||B(\phi) \stackrel{def}{=} \inf \Bigg\{ \tau, \ \tau > 0: \ \forall \lambda: \ \lambda \in R^d \ \Rightarrow$$

$$\max_{\vec{\epsilon}} \mathbf{E} \exp \left(\sum_{j=1}^d \epsilon(j)\lambda(j)\xi(j) \right) \leqslant \exp(\phi(\lambda \cdot \tau)) \Bigg\}. \tag{6.7}$$

The space $B(\phi)$ relative introduced here norm $||\xi||B(\phi)$ and ordinary algebraic operation is also multidimensional rearrangement invariant (symmetric) Banach space.

For example, the *Moment Generating Function, briefly MGF,* $\phi_\xi(\lambda)$ in these spaces, for the r.v. ξ may be defined by the following natural way:

$$\exp[\phi_\xi(\lambda)] \stackrel{def}{=} \max_{\vec{\epsilon} \in \Theta} \mathbf{E} \exp \left(\sum_{j=1}^d \epsilon(j)\lambda(j)\xi(j) \right), \tag{6.8}$$

if of course the random vector ξ is centered and has an exponential tail of distribution. This imply that the natural function $\phi_\xi(\lambda)$ is finite on some non - trivial central symmetrical neighborhood of origin, or equivalently the mean zero random vector ξ satisfies the multivariate Kramer's condition.

Obviously, for the natural function $\phi_\xi(\lambda)$

$$||\xi||B(\phi_\xi) = 1.$$

It is easily to see that this choice of the generating function ϕ_ξ is optimal, but in the practical using often this function can not be calculated in explicit view, if of course there is a possibility to estimate its.

Note that the expression for the norm $||\xi||B(\phi)$ dependent aside from the function ϕ only on the distribution $Law(\xi)$. Thus, this norm and correspondent space $B(\phi)$ are rearrangement invariant (symmetric) in the terminology of the classical book [2], see chapters 1,2.

I. The interrelations between MGF and tail behavior for the random vector.

The following important facts about upper tail estimate for the random vectors is proved in the preprint [30].

Corollary 6.1.a. Let $\phi = \phi(\lambda), \ \lambda \in R^d$ be arbitrary non - negative real valued function, which is finite on some non - empty symmetrical neighborhood of origin. Suppose for given centered $d -$ dimensional random vector $\xi = \vec{\xi}$

$$\mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)} \leqslant e^{\phi(\lambda)}, \ \lambda \in R^d. \tag{6.9}$$

On the other words, $||\xi||B(\phi) \leqslant 1.$ Then for all the non - negative deterministic vector $x = \vec{x}$ there holds

$$U(\vec{\xi}, \vec{x}) \leqslant \exp\left(-\phi^*(\vec{x})\right) \ - \tag{6.10}$$

the multidimensional generalization of Chernov's inequality.

Moreover, the last estimate is essentially non - improvable, still in the one - dimensional case; there are some lower estimates for the considered here multivariate tail function in [30].

Let us obtain the converse conclusion. We retain the notations of lemma 3.1, namely $K(\epsilon), \ \overline{K}(\lambda)$, where $X = R^d_+$; $\zeta^{*'}(\lambda) = grad \zeta^*(\lambda)$,

$$\theta(\lambda) \stackrel{def}{=} \frac{C_1}{(\lambda, \zeta^{*'}(\lambda))} \tag{6.11}$$

for the greatest values $|\lambda| \ : \ \ |\lambda| > |\lambda_0|$, where $\lambda_0 = const \in R^d, \ |\theta(\lambda_0)| \leqslant 0.5$ (say); and apply the assertion of lemma 3.2.

Corollary 6.1.b. Given, as above, for the *centered* r.v. ξ

$$U_\xi(x) \leqslant \exp(-\zeta(x)), \ x = \vec{x} \geqslant 0, \tag{6.12}$$

where $\zeta = \zeta(x)$ is suitable continuous non - negative function.

It is required to estimate for the sufficiently greatest values λ, say, $|\lambda| > e$, the moment generating function (MGF) for the r.v. ξ :

$$g_\xi(\lambda) \stackrel{def}{=} \mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)}, \ \lambda = const \in R^d.$$

Both the theorems: theorem 3.2 and theorem 3.3 remains true, with alike proof, under formulated above multivariate notations and conditions.

The last statement may be reformulated as follows. Assume as above the function $\phi(\cdot)$ be from the Young - Orlicz set, satisfying the restriction of corollary 6.2. The centered non - zero random vector ξ belongs to the space $B(\phi)$:

$$\exists C_1 \in (0,\infty), \ \forall \lambda \in R^d \Rightarrow \mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)} \leqslant e^{\phi(C_1 \cdot \lambda)}, \ \lambda \in R^d,$$

if and only if

$$\exists C_2 \in (0,\infty), \ \forall \, x \in R^d_+ \Rightarrow \ U(\vec{\xi}, \vec{x}) \leqslant \exp\left(-\phi^*(\vec{x}/C_2)\right).$$

More precisely, the following implication holds: there is a finite positive constant $C_3 = C_3(\phi)$ such that for arbitrary non - zero centered r.v. $\xi : \ ||\xi|| = ||\xi||B(\phi) < \infty \ \Leftrightarrow$

$$\forall \lambda \in R^d \Rightarrow \mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)} \leqslant e^{\phi(||\xi|| \cdot \lambda)}$$

if

$$\exists C_3(\phi) \in (0,\infty) \ \forall \, x \in R^d_+ \Rightarrow \ U(\vec{\xi}, \vec{x}) \leqslant$$
$$\leqslant \exp\left(-\phi^*(\vec{x}/(C_3/||\xi||)\right).$$

Corollary 6.1.c. Assume the non - zero centered random vector $\xi = (\xi(1), \xi(2), \ldots, \xi(d))$ belongs to the space $B(\phi)$:

$$\mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)} \leqslant e^{\phi(||\xi|| \cdot \lambda)}, \ \phi \in Y(R^d),$$

and let y be arbitrary positive non - random number. Then $\forall y > 0 \ \Rightarrow$

$$\mathbf{P}\left(\min_{j=1,2,\ldots,n} |\xi(j)| > y\right) \leqslant$$
$$\leqslant 2^d \cdot \exp\left(-\phi^*(y/||\xi||, y/||\xi||, \ldots, y/||\xi||)\right). \tag{6.13}$$

The last estimate may be used in the analyse of discontinuous random fields, see for example [3], [4], [5], [16], [17], [44], [48].

Example 6.1. Let as before $V = R^d$ and $\phi(\lambda) = \phi^{(B)}(\lambda) = 0.5(B\lambda, \lambda)$, where B is non - degenerate positive definite symmetrical matrix, in particular $\det B > 0$. It follows from theorem 6.1 that the (centered) random vector ξ is subgaussian relative the matrix B :

$$\forall \lambda \in R^d \ \Rightarrow \mathbf{E} e^{(\lambda,\xi)} \leqslant e^{0.5(B\lambda,\lambda)||\xi||^2}.$$

iff for some finite positive constant $K = K(B,d)$ and for any non - random positive vector $x = \vec{x}$

$$T_\xi(x) \leqslant e^{-0.5\ \left((B^{-1}x,x)/(K||\xi||^2)\right)}.$$

II. The interrelations between MGF and moments for the random vector.

This case is more complicated than considered before. We intend to generalize the results obtained in [29], [30], especially for the "inverse"assertion.

We need getting to the presentation of the multidimensional case to extend our notations and restrictions. In what follows in this section the variables λ, r, x, ξ are as before vectors from the space R^d, $d = 2, 3, \ldots$, and besides $r = \vec{r} = (\ r(1), r(2), \ldots, r(d)\ ),\ r(j) \geqslant 1$.

A standard vector notations. Let $a = const \in R$, then

$$\vec{a} := (a, a, \ldots, a),\ \dim \vec{a} = d.$$

Further,

$$|r| = |\vec{r}| = \sum_j r(j), \quad |\xi| = |\vec{\xi}| = \sqrt{(\xi, \xi)}\ ;$$

$$k! = \vec{k}! = \prod_{j=1}^d k(j)!,\ \vec{k} = (k(1), k(2), \ldots, k(d));$$

$$\vec{x} \geqslant \vec{y} \ \Leftrightarrow \forall j \quad x(j) \geqslant y(j);$$

$$\vec{x} < \vec{y} \ \Leftrightarrow \forall j \quad x(j) < y(j);$$

$$x^r = \vec{x}^{\vec{r}} = \prod_{j=1}^d x(j)^{r(j)},\ \vec{x} \geqslant 0,$$

$$\ln \vec{\lambda} = \{\ln \lambda(1),\ \ln \lambda(2), \ldots,\ \ln \lambda(d)\}, \quad \vec{\lambda} > 0,$$

$$e^{\vec{\mu}} = \{e^{\mu(1)},\ e^{\mu(2)}, \ldots,\ e^{\mu(d)}\},$$

$$\Phi(\mu) = \Phi(\vec{\mu}) = \phi\left(e^{\vec{\mu}}\right),$$

$$\frac{r}{\lambda \cdot e} = \frac{\vec{r}}{\vec{\lambda}\ e} = \prod_{j=1}^d \left(\frac{r(j)}{e\lambda(j)}\right) = e^{-|r|} \cdot \prod_{j=1}^d \left(\frac{r(j)}{\lambda(j)}\right),$$

$$|\xi|_r = |\vec{\xi}|_{\vec{r}} = \left(\mathbf{E}|\vec{\xi}|^{\vec{r}}\right)^{1/|r|}.$$

We will use now the following elementary inequality

$$x^r \leqslant \left(\frac{r}{\lambda\ e}\right)^r \cdot e^{(\lambda,\ x)}, \quad r,\ \lambda,\ x > 0.$$

As a consequence: let ξ be non - zero $d-$ dimensional mean zero random vector belonging to the space $B(\phi)$. Then

$$\mathbf{E}|\xi|^r \leqslant 2^d\ \left(\frac{r}{\lambda\ e}\right)^r\ e^{\phi(\lambda||\xi||)} =$$

$$= 2^d\ e^{-|r|}\ r^r\ \lambda^{-r}\ e^{\phi(\lambda||\xi||)},\ \lambda > 0.$$

We find likewise the one - dimensional case:

Proposition 6.2.a. Let $\phi(\cdot)$ be arbitrary non - negative continuous function and let the centered numerical r.v. ξ be such that $\xi \in B(\phi)$: $0 < ||\xi|| = ||\xi||B(\phi) < \infty$.

Then

$$|\vec{\xi}|_{\vec{r}} \leqslant e^{-1} \cdot 2^{d/|r|} \cdot \prod_j r(j)^{r(j)/|r|} \cdot e^{-\Phi^*(r)/|r|} \cdot ||\xi||B(\phi),$$

$$r = \vec{r} > 0.$$

Note that in general case the expression $|\xi|_r$ does not represent the norm relative the random vector $\vec{\xi}$.

But if we denote

$$\psi_\Phi(\vec{r}) := e^{-1} \cdot 2^{d/|r|} \cdot \prod_j r(j)^{r(j)/|r|} \cdot e^{-\Phi^*(r)/|r|}$$

and define

$$||\xi||G\psi_\Phi \stackrel{def}{=} \sup_{\vec{r} \geqslant 1} \left[\frac{|\vec{\xi}|_{\vec{r}}}{\psi_\Phi(\vec{r})}\right], \tag{6.14}$$

we obtain some modification of the one - dimensional Grand Lebesgue Space (GLS) norm.

The statement of proposition (6.2.a) may be rewritten as follows.

$$||\xi||G\psi_\Phi \leqslant ||\xi||B(\phi). \tag{6.15}$$

Let us state the inverse up to multiplicative constant inequality.

Given: for the mean zero random vector $\xi = \vec{\xi}$

$$|\vec{\xi}|_{\vec{r}} \leqslant \psi^{|r|}(|r|) \cdot e^{-\Delta(r)/|r|}, \tag{6.16}$$

or equally

$$\mathbf{E}|\vec{\xi}|^{\vec{r}} \leqslant |r|^{|r|} \cdot e^{-\Delta(r)}. \qquad (6.16a)$$

We have for $\vec{\lambda} \geqslant \vec{e}$

$$\mathbf{E}e^{(\lambda,\xi)} - 1 \leqslant C(d)\ \Sigma \ldots \Sigma_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} \left[\frac{\mathbf{E}|\xi|^{\vec{k}}}{\vec{k}!} \right] \leqslant$$

$$C_2(d)\ \Sigma \ldots \Sigma_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} \left[\ \vec{\lambda}^{\vec{k}} \cdot e^{-\Delta(\vec{k})}\ \right].$$

We have as above for the great values λ using again the Stirling's formula

$$\mathbf{E}\exp(\lambda\xi) - 1 \leqslant C_3(d) \sum_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} \exp(\vec{k} \ln(C\lambda) - \Delta(\vec{k})) =$$

$$C_3(d) \sum_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} \exp(\vec{k} \ln(\mu) - \Delta(\vec{k})), \qquad \mu = \vec{\mu} := \ln(C_4 \vec{\lambda}).$$

Let $\epsilon = const \in (0,1)$; we apply the Young's inequality:

$$k\mu \leqslant \Delta(\epsilon k) + \Delta^*(\mu/\epsilon)$$

and denoting as before

$$\sigma_\Delta(\epsilon) = \sigma(\epsilon) := \sum_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} e^{\Delta(\epsilon k) - \Delta(k)} :$$

$$\mathbf{E}\exp(\lambda\xi) - 1 \leqslant e^{\Delta^*(\mu/\epsilon)} \sum_{\vec{k} \geqslant \vec{2}} e^{\Delta(\epsilon k) - \Delta(k)} \leqslant$$

$$\leqslant \sigma_\Delta(\epsilon) \cdot e^{\Delta^*(\mu/\epsilon)}. \qquad (6.17)$$

Introduce also the function $\Delta_1^*(\mu)$ as follows:

$$\Delta_1^*(\mu) := \inf_{\epsilon \in (0,1)} \ln \{ \sigma(\epsilon)\ \exp(\Delta^*(\mu/\epsilon)) \}; \quad (6.18)$$

then we obtain for the values $\vec{\lambda} \geqslant \vec{e}$:

$$\mathbf{E}e^{(\lambda\xi)} \leqslant e^{\Delta_1^*(\ln(C_2\lambda))}.$$

At the same estimate is true also with another but again finite constant C_3 for the values $\vec{\lambda} < -\vec{e}$ and $|\lambda| \leqslant e$, following

$$\exists C_5 < \infty\ \Rightarrow \mathbf{E}e^{(\lambda\xi)} \leqslant e^{\Delta_1^*(\ln(C_6\ |\lambda)|)}. \qquad (6.19)$$

Let us impose the following important condition (Δ) on the source function $\phi_\Delta(\cdot)$:

$$(\Delta): \qquad \exists C_7 \in [1,\infty) \Rightarrow \Delta_1^*(\ln(\ |\lambda)|) \leqslant$$

$$\leqslant \Delta^*(\ln(\ |C_8\lambda)|), \ \lambda = \vec{\lambda} \in R^d. \qquad (6.20)$$

Proposition 6.2.b. Suppose the function $\psi = \psi_\Delta$ satisfies the condition (Δ). Define the following function

$$\phi_\Delta(\lambda) = \Delta^*(\ln|\lambda|),\ \lambda \in R.$$

Our proposition:

$$||\ \xi\ ||B\,(\phi_\Delta) \leqslant C_4\ ||\ \xi\ ||G\psi_\Delta. \qquad (6.21)$$

III. Norm equivalence.

We define a function $\psi(\cdot)$ in the form

$$\psi_{(\phi)}(r) = \psi_{(\phi)}(\vec{r}) = |r| \cdot \exp\left[-\beta^*(r)/|r|\right],\ \vec{r} \geqslant \vec{1}, \qquad (6.22)$$

where $\beta(\cdot)$ is certain even convex continuous function from the set Φ.

Proposition 6.2.c. We have under formulated before conditions and notations

$$||\ \xi\ ||G\psi_{(\phi)} \leqslant e^{-1}\ ||\ \xi\ ||B(\phi). \qquad (6.23)$$

III. The interrelations between tail function and moments norm for the random vectors.

A. "Direct estimate". Given: the random vector $\xi = \vec{\xi}$ such that for some multivariate function $\psi(\cdot) \in \Psi = \Psi_\infty$ $||\vec{\xi}|| = ||\xi|| = ||\xi||G\psi \in (0,\infty)$. It is required to estimate the tail function $U_\xi(x)$, for sufficiently greatest values $x = \vec{x}$, say $\vec{x} > \vec{e}$.

Define the auxiliary function

$$\nu(p) = \nu_\psi(p) := |p| \cdot \ln\psi(p),\ p = \vec{p} \geqslant \vec{1}$$

and correspondingly

$$\nu^*(z) = \nu_\psi^*(z) = \sup_{\vec{p} \geqslant \vec{1}} \left((p,z) - \nu_\psi(p)\right),\ z \in R^d, \vec{z} \geqslant \vec{0}.$$

Suppose $\vec{\xi} \in G\psi,\ \xi \neq 0$. We derive alike the second section, theorem 2.1, using again the Tchebychev - Markov inequality

$$U_\xi(\vec{y}) \leqslant \exp\{\ -\nu^*[\ \ln(\vec{y}/||\xi||)\ ]\ \},\ \vec{y} \geqslant \vec{e}. \ (6.23)$$

B. Let us deduce the "opposite"estimate. Given:

$$U_{\vec{\xi}}(\vec{x}) \leqslant \exp(-\zeta(\vec{x})),\ x \geqslant 0,\ \zeta(\vec{x}) \geqslant 0; \quad (6.24)$$

and we denote $Z(y) = \zeta(\exp y),\ y \in R^d$.

Suppose $Z(\cdot)$ is twice continuous differentiable convex function on certain "octane" $Q_d(C) := (C, \infty)^d,\ C = const > 0$. Denote by $\Lambda = \Lambda(y) = \Lambda_Z(y)$ the *minimal* eigenvalue of the (square) matrix $Z''(y) = \partial^2 Z/\partial y^2$, more detail

$$\left\{ Z''(y) \right\}_{i,j} = \frac{\partial^2 Z}{\partial y_i\ \partial y_j},\ = 1, 2, \ldots d:$$

$$\Lambda(y) = \Lambda_Z(y) := \inf_{x \in R^d,\ ||x||=1} (Z''(y)x, x),$$

and suppose

$$\exists C = const > 0\ \Rightarrow C_1 := \inf_{y \in Q_d(C)} \Lambda_Z(y) > 0. \quad (6.25)$$

Then

$$|\xi|_p \leqslant C_3 \exp\left(Z^*(p)/p\right), \quad (6.26)$$

or equally

$$||\xi||G(Z^*(p)/p) \leqslant C_3 < \infty. \quad (6.26.a)$$

Indeed, we have after integration "by parts"

$$\mathbf{E}|\vec{\xi}|^{\vec{p}} \leqslant \left| \prod_j p_j \int_{R^d_+} \prod_j x_j^{p_j - 1}\ U_{\xi}(\vec{x})\ dx \right| \leqslant$$

$$\leqslant \prod_j p_j \cdot \int_{R^d} e^{(p,y) - Z(y)} dy =: \prod_j p_j\ J(p).$$

We deduce:

$$J(p) \leqslant 2^d \int_{Q_d(C)} e^{(p,y) - Z(y)}\ dy.$$

Denote $S = S(p, y) = (p, y) - Z(y)$ and $y_0 = y_0(p) = argmax_{y \geqslant C_1} S(p, y)$; then

$$S(p, y) \leqslant \max_y S(p, y) - 0.5\Lambda_Z(y)\ ||y - y_0||^2 \leqslant$$

$$Z^*(p) - C_6||y - y_0||^2,\ C_6 = const > 0,$$

therefore

$$J(p) \leqslant C_7(d, Z)^p\ \exp\left(Z^*(p)\right),\ \vec{p} \geqslant \vec{1}. \quad (6.27)$$

We used again the obvious estimate $p^{1/p} \leqslant e^{1/e},\ p \geqslant 1$.

C. Coincidence.

It is convenient for us to rewrite the restriction (6.22) in the following form

$$|\xi|_p \leqslant |p|\ \ e^{\ -\nu(p)/p}\ ,\ p \geqslant 1, \quad (6.28)$$

i.e. in (6.14)

$$\psi(p) := \psi_\nu(p) =\ |p| \cdot\ e^{-\nu(p)/p}. \quad (6.28a)$$

We find analogously theorem 2.3 the following statement.

Suppose that the function $\nu = \nu(p),\ p = \vec{p} \geqslant \vec{1}$ in (6.28) is continuous, convex, and such that the function $y \to \nu(\exp y)$ satisfies the condition (6.25). Then the GLS vector norm estimate for the non - zero r.v. ξ of the form

$$|\xi|_p \leqslant C_1\ |p| \cdot e^{\ -\nu(p)/p}\ ,\ p \geqslant 1, \quad (6.29)$$

is quite equivalent to the following tail inequality

$$U_{\vec{\xi}}(\vec{y}) \leqslant \exp\left(-\nu^*(\ln(\vec{y}/C_2)\right),\ C_2 = const \in (0, \infty),$$

$$\vec{y} \geqslant C_2\vec{e}. \quad (6.30)$$

7 Multidimensional example.

We can construct many multivariate examples by the following way. Recall that the function $g = g(x),\ g : R^d \to R$ is said to be *radial*, or *spherical symmetric,* if it dependent only on the Euclidean length of the variable x :

$$\exists g_1 : R_+ \to R,\ g(x) = g_1(|x|) = g_1((x, x)^{1/2}). \quad (7.1)$$

It is easily to verify that the Young - Fenchel transform of radial function is also radial function. Indeed, let the function $g = g(x),\ x \in R^d$ be spherical symmetric, i.e. satisfies (7.1.) Let also A be arbitrary orthogonal matrix: $A\ A^T = E$. We deduce

$$g^*(y) = \sup_{x \in R^d}((x, y) - g_1(|x|)) = \sup_{z \in R^d}((Az, y) - g_1(|z|))$$

$$= \sup_z((z, A^T y) - g_1(|z|)) = g_1^*(|A^T y|) = g_1^*(|y|).$$

As a slight consequence: for any random vector $\eta = \vec{\eta}$ the estimate of the form

$$\mathbf{E}\exp(\lambda, \eta) \leqslant \exp(C_1|\lambda|^m),\ |\lambda| \geqslant 1,\ m = const > 1 \quad (7.2)$$

is quite equivalent to the tail estimate

$$U_{\vec{\eta}}(x) \leqslant \exp\left(-C_2|x|^{m/(m-1)}\right), \ \min_j |x_j| \geqslant 1. \tag{7.3}$$

Note that if the function $\phi = \phi(\mu), \ \mu \in R$ is from the set Φ, then the multivariate function

$$\chi(\vec{\lambda}) = \phi(|\vec{\lambda}|)$$

can serve as an example of the multivariate function belonging to the set $\Phi : R^d \to R$.

Analogously may be considered the case of a functions of the form

$$\chi(\vec{\lambda}) = \phi((A\ \vec{\lambda}, \vec{\lambda})^{1/2}),$$

where A is symmetrical positive definite matrix: $A \in R^d \otimes R^d$.

8 Concluding remarks.

1. Note that the obtained in this report results does not follow from ones in the articles [37], [38], [39]. Considered here random variables have the exponential decreasing tails of distributions, in contradiction to the considered in mentioned reports.

2. Open problem: under which additional conditions imposed on the function $\psi = \psi(p)$ the assertion of theorem 3.3 remains true in the case when $b < \infty$?

3. It looks like a multi-dimensional case when the support of the function $\psi(\cdot)$ is (partially) bounded?

Список використаних джерел

1. Bagdasarova I.R. and Ostrovsky E.I. (1995). *A nonuniform exponential estimations for large deviations in a Banach space. Theory Probab. Appl.* **45** 638-642.

2. Bennet C., Sharpley R. *Interpolation of operators.* Orlando, Academic Press Inc., (1988).

3. P.J. Bickel and M.J. Wichura. (1971). *Convergence criteria for multiparameter stochastic processes and some applications* Ann. Math. Statist., 42, 1656 - 1670.

4. P. Billingsley. (1968). *Convergence of Probability Measures.* – New York, John Wiley and Sons.

5. P. Billingsley. (1971). *Weak Convergence of Measures: Applications in Probability, Philadelphia.* SIAM, New York - London.

6. Buldygin V.V., Kozachenko Yu.V. *About subgaussian random variables.* Ukrainian Math. Journal, 1980, 32, No 6, 723 - 730.

7. Buldygin V.V., Kozachenko Yu.V. *Metric Characterization of Random Variables and Random Processes.* 1998, Translations of Mathematics Monograph, AMS, v.188.

8. Capone C., Fiorenza A., Krbec M. *On the Extrapolation Blowups in the L_p Scale.* Manuscripta Math., 99(4), 1999, p. 485 - 507.

9. Fernique X. (1975). *Regularite des trajectoires des function aleatiores gaussiennes.* Ecole de Probablite de Saint-Flour, IV - 1974, Lecture Notes in Mathematic. **480**, 1 - 96, Springer Verlag, Berlin.

10. Fernique X, *Characterisation de processus de trajectoires majores ou continues.* Seminaire de Probabilit?s XII. Lecture Notes in Math. 649, (1978), 691 - 706, Springer, Berlin.

11. Fernique X. *Regularite de fonctions aleatoires non gaussiennes.* Ecolee de Ete de Probabilit?s de Saint-Flour XI-1981. Lecture Notes in Math. 976, (1983), 1–74, Springer, Berlin.

12. A.Fiorenza. *Duality and reflexivity in grand Lebesgue spaces.* Collectanea Mathematica, (electronic version), **51**, 2, (2000), 131 - 148.

13. A. Fiorenza and G.E. Karadzhov. *Grand and small Lebesgue spaces and their analogs.* Consiglio Nationale Delle Ricerche, Instituto per le Applicazioni del Calcoto Mauro Picone, Sezione di Napoli, Rapporto tecnico n., **272/03,** (2005).

14. Frolov A.S., Tchentzov N.N. *On the calculation by the Monte-Carlo method definite integrals depending on the parameters.* Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics, (1962), V. 2, Issue 4, p. 714 - 718 (in Russian).

15. Gorskikh I.I., Ostrovsky E.I. *Inversion of Tchebyschev's inequality for subgaussian random variables.* In: Investigation of non - linear and stochastic models of mathematical physics, 1992, Obninsk, OINPE.

16. I.I. Gikhman and A.V. Skorokhod. (1965) *Introduction to the theory of random processes (Russian).* – Moscow, Izdat. "Nauka", 654 pp. English edition: I.I.Gikhman and A.V. Skorokhod. (1969), Introduction to the theory of random processes, Philadelphia, W.B. Saunders Co., xiii+516 pp.

17. Grigorjeva M.L., Ostrovsky E.I. *Calculation of Integrals on discontinuous Integrands by means of depending Trials method.* Journal of Computational Mathematics and Mathematical Physics, (1996), V. 36, Issue 12, p. 28-39 (in Russian).

18. T.Iwaniec and C. Sbordone. *On the integrability of the Jacobian under minimal hypotheses.* Arch. Rat.Mech. Anal., **119,** (1992), 129 - 143.

19. T.Iwaniec, P. Koskela and J. Onninen. *Mapping of finite distortion: Monotonicity and Continuity.* Invent. Math., **144,** (2001), 507 - 531.

20. Jawerth B., Milman M. *Extrapolation Theory with Applications.* Mem. Amer. Math. Soc., **440,** (1991)

21. Kolmogorov A.N. *On the Skorokhod convergence.* Theory of probability and its applications. V.1, (1956), pp. 239 - 247 (Russian), pp. 215 - 222, (English).

22. Kozachenko Yu. V., Ostrovsky E.I. (1985). *The Banach Spaces of random Variables of subgaussian Type.* Theory of Probab. and Math. Stat. (in Russian). Kiev, KSU, **32**, 43 - 57.

23. Krasnosel'skii, M.A.; Rutickii, Ya.B. (1961). *Convex Functions and Orlicz Spaces.* Groningen: P.Noordhoff Ltd.

24. E.Liflyand, E. Ostrovsky and L. Sirota. *Structural properties of Bilateral Grand Lebesque Spaces.* Turk. Journal of Math., **34,** (2010), 207 - 219.

25. Neuhaus G. (1971). *On weak convergence of stochastic processes with multidimensional time parameters.* Ann. Math. Statist. **42,** 1285-1295.

26. Ledoux M., Talagrand M. (1991) *Probability in Banach Spaces.* Springer, Berlin, MR 1102015.

27. Ostrovsky E.I. (1999). *Exponential estimations for Random Fields and its applications,* (in Russian). Moscow - Obninsk, OINPE.

28. Ostrovsky E.I. (1982). *Generalization of Buldygin - Kozatchenko norms and CLT in Banach space.* Theory Probab. Appl., **27**, V.3, p. 617 - 619, (in Russian).

29. Ostrovsky E. and Sirota L. *Multidimensonal probabilistic rearrangement invariant spaces: a new approach.* arXiv:1202.3130v1 [math.PR] 14 Feb 2012

30. Ostrovsky E. and Sirota L. *Vector rearrangement invariant Banach spaces of random variables with exponential decreasing tails of distributions.* arXiv:1510.04182v1 [math.PR] 14 Oct 2015

31. Ostrovsky E. and Sirota L. *Non-asymptotical sharp exponential estimates for maximum distribution of discontinuous random fields.* arXiv:1510.08945v1 [math.PR] 30 Oct 2015

32. Ostrovsky E. and Sirota L. *Entropy and Grand Lebesgue Spaces approach for Prokhorov-Skorokhod continuity of random processes, with tail estimates.* arXiv:1512.01909v1 [math.PR] 7 Dec 2015

33. Ostrovsky E. and Sirota L. *Banach spaces characterization of random vectors with exponential decreasing tails of distribution.* arXiv:1601.04766v1 [math.PR] 19 Jan 2016

34. Ostrovsky E.I. (2002). *Exact exponential estimations for random field maximum distribution.* Theory Probab. Appl., **45**. v.3, 281 - 286.

35. Ostrovsky E., Sirota L. *Moment Banach Spaces: Theory and Applications.* HIAT Journal of Science and Engineering, Holon, Israel, v. 4, Issue 1 - 2, (2007), 233 - 262.

36. Ostrovsky E., Sirota L. *Nikolskii-type inequalities for rearrangement invariant spaces.* arXiv:0804.2311v1 [math.FA] 15 Apr 2008

37. Ostrovsky E., Sirota L. *A Banach rearrangement norm characterization for tail behavior of measurable functions (random variables).* arXiv:1210.1168v1 [math.FA] 3 Oct 2012

38. Ostrovsky E., Sirota L. *Individual lower bound for Calderon's generalized Lorentz norm estimates.* arXiv:1210.4832v1 [math.FA] 17 Oct 2012

39. Ostrovsky E., Sirota L. *Hardy's operator and normability of generalized Lorentz - Marcinkiewicz spaces, with sharp or weakly sharp constant estimation.* arXiv:1211.6415v1 [math.FA] 27 Nov 2012

40. Ostrovsky E., Sirota L. *Sharp moment estimates for polynomial martingales.* arXiv:1410.0739v1 [math.PR] 3 Oct 2014

41. Ostrovsky E. *Exponential Orlicz Spaces: New Norms and Applications.* arXiv:math/0406534v1 [math.FA] 25 Jun 2004

42. Pizier G. *Condition d' entropic assupant la continuite de certains processus et applications a l'analyse harmonique.* Seminaire d analyse fonctionalle. (1980), Exp.13, p. 23-34

43. Prokhorov Yu. V. *Multivariate distributions: Inequalities and limit theorems.* Journal of Soviet Mathematics, September 1974, Volume 2, Issue 5, pp 475 - 488.

44. Prokhorov Yu. V. *Convergence of random processes and limit theorems in probability.* Theory of probability and its applications. V.1, (1956), pp. 177 - 238, (Russian), pp. 151 - 214, (English).

45. Rao M.M., Ren Z.D. *Theory of Orlicz Spaces.* Marcel Dekker Inc., 1991. New York, Basel, Hong Kong.

46. Rao M.M., Ren Z.D. *Applications of Orlicz Spaces.* Marcel Dekker Inc., 2002. New York, Basel, Hong Kong.

47. Seneta E. *Regular varying functions.* Moskow, Nauka, 1985, (in Russian.)

48. Skorokhod A.V. *Limit theorems for stochastic processes.* Teor. veroyatn. i Primen., 1956, t. 1, no. 3, p. 289 - 319 (in Russian); English transl.: Theor. Probab. Appl., 1956, v. 1, no. 3, p. 261 - 290.

Received: 20.02.2017

УДК 519.21

О.М. Шевчик, *аспірант*

Максимальні локально нільпотентні підалгебри алгебри Лі $W_3(\mathbb{K})$

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01033, Київ, вул. Володимирська, 64,
e-mail: oshev4ik@gmail.com

O.M. Shevchyk, *Ph.D student*

Maximal locally nilpotent subalgebras of the Lie algebra $W_3(\mathbb{K})$

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01033, Kyiv, 64 Volodymyrska str.,
e-mail: oshev4ik@gmail.com

Нехай K – довільне поле характеристики нуль і A – кільце многочленів від трьох зміних над K. Алгебра Лі W(3, K) всіх K-диференціювань алгебри A містить трикутну підалгебру u(3, K), яка складається з трикутних диференціювань кільця многочленів A. Алгебра Лі u(3, K) локально нільпотентна, але не нільпотентна, її будова і вкладення в W(3, K) представляють значний інтерес, оскільки елементи із u(3, K) визначають автоморфізми кільця многочленів A. В роботі доведено, що u(3, K) є максимальною (за включенням) локально нільпотентною підалгеброю алгебри Лі W(3, K). Також побудована ще одна максимальна локально нільпотентна підалгебра s(3, K) із W(3, K), яка містить не локально нільпотентні диференціювання алгебри A і тому не є спряженою з u(3, K). Як наслідок, використовуючи попередні результати в цьому напрямі, доведено, що кожна максимальна локально нільпотентна підалгебра L рангу 3 над A і розмірності не менше 4 над полем K ізоморфна одній із підалгебр u(3, K) або s(3, K).

Ключові слова: кільце многочленів, алгебра Лі, диференціювання, локально нільпотентний

Let K be a field of characteristic zero and A the polynomial ring over K. The Lie algebra W(3, K) of all K-derivations on A contains the triangular Lie algebra u(3, K), consisting of all triangular derivations on A. The Lie algebra u(3, K) is locally nilpotent but not nilpotent, its structure and embeddings in W(3, K) is of great interest because elements of u(3, K) define automorphisms of the polynomial ring A. It is proved that u(3, K) is a maximal (by inclusion) locally nilpotent subalgebra of W(3, K). We also built a maximal locally nilpotent subalgebra s(3, K) of W(3, K) which contains non locally nilpotent derivations of A, the Lie algebra s(3, K) is therefore non-conjugated with u(3, K). As consequence we proved (using some previous results in this direction) that every maximal locally nilpotent subalgebra L of rank 3 over A and of dimension at least 4 over K is isomorphic either to u(3, K) or to s(3, K).

Key Words: polynomial ring, Lie algebra, derivation, locally nilpotent.
Статтю представив доктор фізико-математичних наук, професор В.В.Кириченко

1 Вступ

Нехай $\mathbb{K}$ – довільне поле характеристики нуль і $A = \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$ – кільце многочленів над $\mathbb{K}$. Нагадаємо, що $\mathbb{K}$-лінійне відображення $D : A \to A$ називається $\mathbb{K}$-диференціюванням кільця A, якщо $D(fg) = D(f)g + fD(g)$ для довільних $f, g \in A$. Векторний простір $Der_{\mathbb{K}}A$ (над полем $\mathbb{K}$) всіх $\mathbb{K}$-диференціювань A є алгеброю Лі над $\mathbb{K}$ відносно операції комутування

$$[D_1, D_2] = D_1D_2 - D_2D_1,$$

де $D_1, D_2 \in Der_{\mathbb{K}}A$. Будова алгебри Лі $Der_{\mathbb{K}}A$ і її підалгебр представляє великий інтерес, оскільки у випадку $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ або $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ диференціювання D кільця многочленів A може розглядатися як векторне поле на $\mathbb{K}^n$ з поліноміальними коефіцієнтами. Дослідженню алгебр Лі з поліноміальними, раціональними коефіцієнтами чи коефіцієнтами із кільця формальних степеневих рядів присвячено багато робіт різних авторів (див., наприклад, [1], [2], [6]). В роботі [4] дано опис максимальних (за включенням) підалгебр Лі із $Der_{\mathbb{K}}A$, де A – область цілісності над $\mathbb{K}$, при умові, що $\mathrm{rk}_A L \leqslant 3$. Ці алгебри Лі ізоморфні підалгебрам трикутної підалгебри $u_3(\mathbb{K})$ із $Der_{\mathbb{K}}\mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$. Тому цікавим є питання про максимальні локально нільпотентні підалгебри із $W_3(\mathbb{K})$. Основний результат роботи: доведено максимальність в класі локально нільпотентних підалгебр підалгебри $u_3(\mathbb{K}) \in W_3(\mathbb{K})$ і підалгебри $s_3(\mathbb{K})$ вигляду $s_3(\mathbb{K}) = \mathbb{K}\left(\frac{\partial}{\partial x_3},\ x_1\frac{x_3^i}{i!}\frac{\partial}{\partial x_1},\ x_2\frac{x_3^i}{j!}\frac{\partial}{\partial x_2},\ i,j \geqslant 0 \right)$. Як наслідок, отримано опис максимальних локально нільпотентних підалгебр рангу 3 над A із $W_3(\mathbb{K})$.

Позначення в роботі стандартні, основне поле $\mathbb{K}$ довільне, характеристики нуль. Через A ми позначаємо кільце многочленів $A = \mathbb{K}[x_1, x_2, \ldots, x_n]$ і через R – його поле часток $R = \mathbb{K}(x_1, x_2, \ldots, x_n)$. Алгебру Лі всіх $\mathbb{K}$-диференціювань кільця A будемо позначати через $W_n(\mathbb{K})$. Якщо $g_1, \ldots, g_m$ – елементи алгебри Лі L над полем $\mathbb{K}$, то через $\mathbb{K}\langle g_1, \ldots, g_m\rangle$ позначається лінійна оболонка цих елементів над $\mathbb{K}$. Для підалгебри $L \subseteq W_n(\mathbb{K})$ L над R визначимо ранг $\mathrm{rk}_R L$ над полем R як розмірність $\dim_R RL$. Через $u_n(\mathbb{K})$ позначається трикутна підалгебра із $W_n(\mathbb{K})$, яка складається із диференціювань вигляду

$$D = f_1(x_2, \ldots, x_n)\frac{\partial}{\partial x_1} + f_2(x_3, \ldots, x_n)\frac{\partial}{\partial x_2} +$$

$$+ \ldots + f_n\frac{\partial}{\partial x_n},\ f_n \in \mathbb{K}.$$

Основані властивості диференціювань можна знайти в [3]. Нагадаємо, що алгебра Лі L називається локально нільпотентною, якщо кожна її скінченнопороджена підалгебра нільпотентна. Алгебра Лі $u_n(\mathbb{K})$ локально нільпотентна, але ненільпотентна (див. [1]).

2 Максимальність $u_3(\mathbb{K})$ в $W_3(\mathbb{K})$

Для доведення основної теореми цього розділу наведемо дві допоміжні леми.

Лема 1. *(див., наприклад, [?]). Нехай $D_1, D_2 \in W_3(\mathbb{K})$ і $a, b \in R$. Тоді виконується рівність $[aD_1, bD_2] = ab[D_1, D_2] + aD_1(b)D_2 - bD_2(a)D_1$.*

Лема 2. *Якщо існує елемент $D_0 \in W_3(\mathbb{K}) \setminus u_3(\mathbb{K})$ такий, що підалгебра L_1, породжена D_0 і підалгеброю $u_3(\mathbb{K})$ локально нільпотентна, то підалгебра L_1 містить елемент D вигляду $D = \alpha_1 x_1\frac{\partial}{\partial x_1} + (\beta_1 x_1 + \beta_2 x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} + (\gamma_1 x_1 + \gamma_2 x_2 + \gamma_3 x_3)\frac{\partial}{\partial x_3}$, де $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k \in \mathbb{K}$ і хоча б один із цих коефіцієнтів ненульовий.*

Доведення. Оскільки елементи $\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}$ утворюють базис модуля $W_3(\mathbb{K})$ над кільцем A, то елемент D_0 із умови леми однозначно записується у вигляді

$$D_0 = r_1\frac{\partial}{\partial x_1} + r_2\frac{\partial}{\partial x_2} + r_3\frac{\partial}{\partial x_3}, \quad (1)$$

де $r_i \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$. Покажемо, що коефіцієнти r_i мають вигляд із умови леми. Доведення для зручності розділимо на частини:

Крок 1. Покажемо спочатку, що елемент D_0 вигляду (1) із $W_3(\mathbb{K})$ $u_3(\mathbb{K})$ можна вибрати так щоб r_1 мав вигляд $r_1 = \alpha_1 x_1$, $\alpha_1 \in \mathbb{K}$. Якщо $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} = 0$, то $r_1 = r_1(x_2, x_3) \in \mathbb{K}[x_2, x_3]$ і тоді $r_1\frac{\partial}{\partial x_1} \in u_3(\mathbb{K})$. Легко бачити, що елемент $D_0 - r_1\frac{\partial}{\partial x_1}$ належить підмножині $L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ і його можна вибрати замість елемента D_0 і вважати, що $r_1 = 0 = \alpha_1 x_1$. Нехай тепер $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \neq 0$. Якщо $deg_{x_1} r_1 = m_1 \geqslant 2$, то елемент

$$\overline{D}_0 = [\frac{\partial}{\partial x_1}, [\frac{\partial}{\partial x_1}, \ldots, (\frac{\partial}{\partial x_1}, D_0]..]],$$

де комутування $m_1 - 1$ разів, не лежить в підалгебрі $u_3(\mathbb{K})$ і для елемента $\overline{r}_1 = (\frac{\partial}{\partial x_1})^{m_1 - 1}(r_1)$ отримаємо $deg_{x_1}\bar{r_1} = 1$, де

$$\bar{D_0} = \bar{r_1}\frac{\partial}{\partial x_1} + \bar{r_2}\frac{\partial}{\partial x_2} + \bar{r_3}\frac{\partial}{\partial x_3}$$

для деяких $\bar{r_2}, \bar{r_3} \in A$. Замінюючи елемент D_0 на $\bar{D_0}$ ми можемо зразу вважати, що $deg_{x_1} r_1 = 1$ і тоді

$$r_1 = x_1 f_1(x_2, x_3) + g_1(x_2, x_3)$$

для деяких многочленів $f_1, g_1 \in \mathbb{K}[x_2, x_3]$, $f_1 \neq 0$. Оскільки $g_1(x_2, x_3)\frac{\partial}{\partial x_1} \in u_3(\mathbb{K})$, то, не втрачаючи загальності можна вважати, що $g_1(x_2, x_3) = 0$ і $r_1 = x_1 f_1(x_2, x_3)$. Якщо $f_1(x_2, x_3) = const$, то покладаючи $\alpha_1 = f_1(x_2, x_3)$ ми отримаємо потрібний вираз для коефіцієнта r_1 в виразі (1). Якщо $deg_{x_2} f_1 \geqslant 1$, або $deg_{x_3} f_1 \geqslant 1$, то замінюючи D_0 на елемент

$$(\frac{\partial}{\partial x_2}, (\frac{\partial}{\partial x_2}, \ldots, (\frac{\partial}{\partial x_2}, D_0)))$$

або на

$$(\frac{\partial}{\partial x_3}, (\frac{\partial}{\partial x_3}, \ldots, (\frac{\partial}{\partial x_3}, D_0)))$$

і повторюючи проведені вище міркування ми можемо без втрати загальності вважати, що $f_1 = const$ і тоді r_1 має потрібний вигляд.

Крок 2. Покажемо, що D_0 можна вибрати так, щоб у виразі (1) мала місце рівність

$$r_2 = \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2, \quad \beta_i \in \mathbb{K}.$$

Якщо $r_2 = r_2(x_3) \in \mathbb{K}(x_3)$, то $r_2\frac{\partial}{\partial x_2} \in u_3(\mathbb{K})$ і тому, не втрачаючи загальності можна вважати, що $deg_{x_1}r_2 \geqslant 1$ або $deg_{x_2}r_2 \geqslant 1$. Нехай, наприклад, $deg_{x_1}r_2 \geqslant 1$. Повторюючи міркування із попереднього абзацу можна показати, що без втрати загальності виконується рівність $deg_{x_1}r_2 = 1$. Тоді

$$r_2 = x_1g_1(x_2, x_3) + g_2(x_2, x_3)$$

для деяких многочленів $g_1, g_2 \in \mathbb{K}[x_2, x_3], g_1 \neq 0$. Як і вище, можна показати, що не втрачаючи загальності можна вважати, що $deg_{x_1}g_1 = 0$ і $deg_{x_3}g_1 = 0$. Але тоді

$$r_3 = \beta_1x_1 + g_2(x_2, x_3)$$

для деякого $\beta_1 \in \mathbb{K}$. Якщо $deg_{x_2}g_2 = 0$, то $g_2(x_3)\frac{\partial}{\partial x_3} \in u_3(\mathbb{K})$ і тому без втрати загальності вважаємо, що $g_2 = 0$ і $r_2 = \beta_1x_1$, тобто r_2 має потрібний вигляд. Нехай $deg_{x_2}g_2 \geqslant 1$. Як і раніше можна вважати (при необхідності понизивши степінь), що $deg_{x_2}g_2 = 1$, тобто

$$r_2 = \gamma x_1 + \delta x_2h(x_3) + \mu h_1(x_3).$$

Ті ж самі міркування показують, що елемент D_0 в (1) можна вибрати так, що $r_2 = \gamma x_1 + \beta x_2$ для деяких $\beta, \gamma \in \mathbb{K}$ і r_2 має потрібний вигляд. Аналогічно можна розглянути випадок, коли $deg_{x_2}r_2 \geqslant 1$. Таким чином,

$$r_2 = \beta_1x_1 + \beta_2x_2, \beta_i \in \mathbb{K}.$$

Аналогічні міркування показують, що коефіцієнт r_3 в (1) можна вважати рівним

$$r_3 = \gamma_1x_1 + \gamma_2x_2 + \gamma_3x_3$$

для деяких $\gamma_i \in \mathbb{K}$. Оскільки

$$D_0 = \alpha_1x_1\frac{\partial}{\partial x_1} + (\beta_1x_1 + \beta_2x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} +$$

$$+(\gamma_1x_1 + \gamma_2x_2 + \gamma_3x_3)\frac{\partial}{\partial x_3}$$

належить множині $L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$, то хоча б один із коефіцієнтів $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k$ ненульовий.

□

Теорема 1. *Підалгебра $u_3(\mathbb{K})$ є максимальною (за включенням) локально нільпотентною підалгеброю алгебри Лі $W_3(\mathbb{K})$.*

Доведення. Припустимо від супротивного, що $u_3(\mathbb{K})$ не є максимальною локально нільпотентною підалгеброю із $W_3(\mathbb{K})$ і $u_3(\mathbb{K}) \subset L_1$ – строге включення для деякої локально нільпотентної підалгебри L_1 із $W_3(\mathbb{K}$. Очевидно, що $\mathrm{rk}_R L_1 = 3$. За лемою 2 існує елемент $D_0 \in L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ вигляду

$$D_0 = \alpha_1x_1\frac{\partial}{\partial x_1} + (\beta_1x_1 + \beta_2x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} +$$

$$+(\gamma_1x_1 + \gamma_2x_2 + \gamma_3x_3)\frac{\partial}{\partial x_3},$$

де $\alpha_i, \beta_j, \gamma_k \in \mathbb{K}$, і хоча б один із цих елементів ненульовий. Покажемо спочатку, що елемент $D_0 \in L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ можна вибрати у вигляді

$$D_0 = \alpha_1x_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \beta_2x_2\frac{\partial}{\partial x_2} + \gamma_3x_3\frac{\partial}{\partial x_3},$$

де хоча б один із коефіцієнтів $\alpha_1, \beta_2, \gamma_3$ ненульовий. Відзначимо спочатку, що, не втрачаючи загальності, можна вважати, що $\gamma_1 = 0$. Дійсно, нехай це не так і для деякого елемента D_0 виконується рівність $\gamma_1 \neq 0$. Тоді

$[x_3\frac{\partial}{\partial x_1}, D_0] = (\gamma_1x_1 - \gamma_2x_2 - \gamma_3x_3 + \alpha_1x_3)\frac{\partial}{\partial x_1} + \beta_1x_3\frac{\partial}{\partial x_2} + \gamma_1x_3\frac{\partial}{\partial x_3} \in L_1,$
і, оскільки $\gamma_1 \neq 0$, то

$$[x_3\frac{\partial}{\partial x_1}, D_0] \in L_1 \setminus u_3(\mathbb{K}).$$

Доданки

$$\beta_1x_3\frac{\partial}{\partial x_2}, \quad \text{і} \quad (-\gamma_2x_2 - \gamma_3x_3 + \alpha_1x_3)\frac{\partial}{\partial x_1}$$

лежать в підалгебрі $u_3(\mathbb{K})$ і тому можна вважати, що отриманий елемент має вигляд

$$-\gamma_1x_1\frac{\partial}{\partial x_1} + \gamma_1x_3\frac{\partial}{\partial x_3}.$$

Але тоді D_0 має потрібний вигляд і тому, не втрачаючи загальності, можна вважати, що $\gamma_1 = 0$. Аналогічно можна показати, що D_0 можна вибрати так, щоб $\gamma_2 = 0$. Тому далі вважаємо, що $\gamma_1 = \gamma_2 = 0$. Покажемо тепер, що без втрати загальності можна вважати, що $\beta_1 = 0$. Нехай це не так і для деякого $D_0 \in L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ маємо $\beta_1 \neq 0$. Розглянемо елемент

$$[x_2\frac{\partial}{\partial x_1}, D_0] = [x_2\frac{\partial}{\partial x_1}, \alpha_1x_1 + (\beta_1x_1 + \beta_2x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} +$$

$$+\gamma_3x_3\frac{\partial}{\partial x_3}] = (\alpha_1x_2 - \beta_1x_2 - \beta_2x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} + \beta_1x_2\frac{\partial}{\partial x_2}.$$

Оскільки

$$(\alpha_1 - \beta_2)x_2\frac{\partial}{\partial x_1} \in u_3(\mathbb{K}),$$

то в $L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ лежить елемент вигляду $-\beta_1 x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + \beta_1 x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}$, який має потрібний вигляд. Тому можна вважати, що $\beta_1 = 0$ і тому в $L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ лежить елемент D_0 вигляду

$$D_0 = \alpha_1 x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + (\beta_2 x_2)\frac{\partial}{\partial x_2} + (\gamma_3 x_3)\frac{\partial}{\partial x_3},$$

де хоча б один із коефіцієнтів $\alpha_1, \beta_2, \gamma_3$ ненульовий.

Покажемо тепер, що $\alpha_1 = \beta_2 = \gamma_3$. Розглянемо рівність

$$[D_0, x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}] = (\gamma_3 - \beta_3) x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}.$$

Якщо $\gamma_3 \neq \beta_2$, то лінійний оператор adD_0 має на L_1 власний вектор $x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$ з ненульовим власним числом $\gamma_3 - \beta_2$. Це суперечить локальній нільпотентності підалгебри L_1. Тому $\beta_3 = \gamma_2$. Аналогічно із рівності

$$[D_0, x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}] = (\beta_2 - \alpha_1) x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}$$

випливає, що $\alpha_1 = \beta_2$, а рівність

$$[D_0, x_3 \frac{\partial}{\partial x_1}] = (\gamma_3 - \alpha_1) x_3 \frac{\partial}{\partial x_1}$$

дає співвідношення $\alpha_1 = \gamma_3$. Але тоді в $L_1 \setminus u_3(\mathbb{K})$ лежить диференціювання Ейлера

$$E_3 = x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}.$$

Далі, $x_2^2 \frac{\partial}{\partial x_1} \in u_3(\mathbb{K})$ і тому

$$[E_3, x_2^2 \frac{\partial}{\partial x_1}] = x_2^2 \frac{\partial}{\partial x_1} \in L_1.$$

Це означає, що $x_2^2 \frac{\partial}{\partial x_1}$ – власний вектор для $\mathrm{ad}E_3$ в L_1 з власним числом $\lambda = 1$. Це суперечить умові локальної нільпотентності підалгебри L_1. Отримана суперечність показує, що $L_1 = u_3(\mathbb{K})$ і $u_3(\mathbb{K})$ – максимальна локально нільпотентна підалгебра із $W_3(\mathbb{K})$.

□

В алгебрі Лі $W_3(\mathbb{K})$ ми вкажемо ще одну максимальну локально нільпотентну підалгебру рангу 3 над R (яка неізоморфна підалгебрі $u_3(\mathbb{K})$).

Теорема 2. *Нехай L – підалгебра із $W_3(\mathbb{K})$ вигляду $L = \mathbb{K}\ (\frac{\partial}{\partial x_3},\ x_1 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_1},\ x_2 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_2},\ i = 0, 1, 2, \ldots)$. Тоді L – максимальна (за включенням) локально нільпотентна підалгебра рангу 3 над R із алгебри Лі $W_3(\mathbb{K})$.*

Доведення. Алгебра Лі L містить абелевий ідеал

$$N = \mathbb{K}\langle \frac{\partial}{\partial x_3}, x_1 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_1}, x_2 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_2}, i = 0, 1, 2, \ldots \rangle$$

корозмірності 1 в L.

Очевидно, $\mathrm{ad}(\frac{\partial}{\partial x_3})$ – локально нільпотентний лінійний оператор на векторному просторі N. Звідси легко випливає, що алгебра Лі L локально нільпотентна. Припустимо від супротивного, що L не є максимальною локально нільпотентною і міститься (строго) в деякій більшій локально нільпотентній підалгебрі L_1 із $W_3(\mathbb{K})$. Візьмемо довільний елемент $D_0 \in L_1 \setminus L$. Тоді елемент D_0 однозначно запишеться у вигляді

$$D_0 = r_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + r_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}, \quad r_i \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3].$$

Покажемо, що $r_1 = x_1 f_1(x_3)$ для деякого многочлена $f_1(t) \in \mathbb{K}[t]$. Якщо $r_1 = 0$, то r_1 має потрібний вигляд. Тому далі вважаємо, що $r_1 \neq 0$. Покажемо, що елемент $D_0 \in L_1 \setminus L$ можна вибрати так, щоб $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \neq 0$. Дійсно, нехай навпаки $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} = 0$. Тоді $r_1 = g(x_2, x_3)$ для деякого многочлена $g \in \mathbb{K}[x_2, x_3]$. Має місце рівність

$$[x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, D_0] = -g(x_2, x_3)\frac{\partial}{\partial x_1} + \bar{r_2} \frac{\partial}{\partial x_2} + \bar{r_3} \frac{\partial}{\partial x_3}$$

для деяких многочленів $\bar{r_2}, \bar{r_3} \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$. Оскільки $x_1 \frac{\partial}{\partial x_1} \in L_1$, то приєднане диференціювання $ad(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1})$ з огляду на останню рівність не є локально нільпотентним диференціюванням алгебри Лі L_1. Це суперечить локальній нільпотентності підалгебри L_1 і тому $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} \neq 0$. Покажемо далі, що $deg_{x_1} r_1 = 1$. Дійсно, нехай це не так і $deg_{x_1} r_1 = m > 1$. Із рівностей

$$[x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, r_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + r_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}] =$$

$$= (x_1 \frac{\partial r_1}{\partial x_1} - r_1)\frac{\partial}{\partial x_1} + \bar{r_2} \frac{\partial}{\partial x_2} + \bar{r_3} \frac{\partial}{\partial x_3},$$

де $\bar{r_i} \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$ та із умови $deg_{x_1} r_1 = m > 1$ отримаємо, що $\deg_{x_1}(x_1 \frac{\partial r_1}{\partial x_1} - r_1) = m$.

Звідси легко, випливає, що приєднане диференціювання $ad(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1})$ не є локально нільпотентним диференціюванням алгебри Лі L_1. Це суперечить її вибору і тому $deg_{x_1} r_1 = 1$. Тоді

$$r_1 = x_1 f(x_2, x_3) + g(x_2, x_3)$$

для деяких многочленів $f, g \in \mathbb{K}[x_2, x_3]$ і $f \neq 0$.

Зауважимо, що $\frac{\partial r_1}{\partial x_2} = 0$. Дійсно, нехай це не так і $deg_{x_2} r_1 = m > 0$. Тоді маємо

$$[x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}, r_1 \frac{\partial}{\partial x_1} + r_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}] =$$

$$= x_2 \frac{\partial r_1}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x_1} + \overline{r}_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + \overline{r}_3 \frac{\partial}{\partial x_3} \in L_1,$$

для деяких многочленів $\overline{r}_2, \overline{r}_3 \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$. Із останньої рівності ми бачимо, що $\deg_{x_2} x_2 \frac{\partial r_1}{\partial x_2} = m$ і тому, як неважко переконатися, приєднане диференціювання $\mathrm{ad}(x_2 \frac{\partial}{\partial x_2})$ не є локально нільпотентним диференціюванням алгебри Лі L_1, що суперечить її вибору. Отримана суперечність показує, що $\frac{\partial r_1}{\partial x_2}$ і тому $r_1 = x_1 f(x_3) + g(x_3)$ для деяких многочленів $f, g \in \mathbb{K}[x_3]$. Оскільки

$$x_1 f(x_3) \frac{\partial}{\partial x_1} \in L \subseteq L_1,$$

то елемент D_0 із $L_1 \setminus L_0$ можна вибрати у вигляді

$$D_0 = g(x_3) \frac{\partial}{\partial x_1} + r_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}.$$

Але тоді для коефіцієнта $r_1 = g(x_3)$ маємо $\frac{\partial r_1}{\partial x_1} = 0$, що неможливо за доведеним вище. Тому

$$D_0 = x_1 f_1(x_3) \frac{\partial}{\partial x_1} + r_2 \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}.$$

Аналогічно можна довести, що $r_2 = x_2 f_2(x_3)$ для деякого многочлена $f_2(x_3) \in \mathbb{K}[x_3]$. Таким чином, елемент D_0 можна вибрати у вигляді

$$D_0 = x_1 f_1(x_3) \frac{\partial}{\partial x} + x_2 f_2(x_3) \frac{\partial}{\partial x_2} + r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$$

для деякого $r_3 \in \mathbb{K}[x_1, x_2, x_3]$. Покажемо тепер, що $r_3 \in \mathbb{K}$. Оскільки

$$x_1 f_1(x_3) \frac{\partial}{\partial x_1} + x_2 f_2(x_3) \frac{\partial}{\partial x_2} \in L \subseteq L_1,$$

то, не втрачаючи загальності можна вважати, що $D_0 = r_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$.

Повторюючи міркування із попередніх абзаців неважко показати, що $r_3 = f_3(x_3)$ для деякого многочлена $f_3(x_3) \in \mathbb{K}[x_3]$. Якщо $deg_{x_3} f_3 = 0$, або $r_3 = 0$, то все доведено. Нехай, навпаки, $deg_{x_3} f_3 = m \gtrless 1$. Оскільки

$$[\frac{\partial}{\partial x_3}, f_3(x_3) \frac{\partial}{\partial x_3}] = \frac{\partial f_3}{\partial x_3} \frac{\partial}{\partial x_3} \in L_1,$$

то, не втрачаючи загальності, можна вважати, що $deg_{x_3} f_3 = m = 1$. Але тоді елемент D_0 можна взяти у вигляді $D_0 = x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}$. Візьмемо елемент $D_1 = x_1 x_2^2 \frac{\partial}{\partial x_1} \in L$, і розглянемо добуток

$$[D_0, D_1] = [x_3 \frac{\partial}{\partial x_3}, x_1 x_3^2 \frac{\partial}{\partial x_1}] =$$

$$= -2 x_1 x_3^2 \frac{\partial}{\partial x_1} = -2 D_1.$$

Звідси випливає, що приєднане диференціювання $\mathrm{ad} D_0$ алгебри Лі L_1 не є локально нільпотентним, що суперечить локальній нільпотентності підалгебри L_1. Отримана суперечність показує, що $r_3 = c \in \mathbb{K}$ і тоді $D_0 \in L$. Це означає, що $L_1 = L$ – максимальна локально нільпотентна підалгебра із $W_3(\mathbb{K})$. □

Наслідок 1. *Кожна максимальна (за включенням) локально нільпотентна підалгебра рангу 3 із $W_3(\mathbb{K})$ ізоморфна одній із наступних підалгебр із W_3*

L_1 – максимальна нільпотентна підалгебра рангу 3 над R розмірності 3 над $\mathbb{K}$.

$L_2 = u_3(\mathbb{K})$ – трикутна підалгебра із $W_3(\mathbb{K})$.

$L_3 = \mathbb{K}\ (\frac{\partial}{\partial x_3},\ x_1 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_1},\ x_2 \frac{x_3^i}{i!} \frac{\partial}{\partial x_2},\ i = 0, 1,)$.

Доведення. Із теорем 1 і 2 випливає, що L_2 і L_3 – максимальні локально нільпотентні підалгебри із $W_3(\mathbb{K})$. Підалгебра L_1 максимальна локально нільпотентна за умовою (зауважимо, що $W_3(\mathbb{K})$ такі підалгебри існують, наприклад,

$$L_1 = \mathbb{K}(x_1 \frac{\partial}{\partial x_1}, x_2 \frac{\partial}{\partial x_2}, x_3 \frac{\partial}{\partial x_3})).$$

Нехай тепер L – максимальна локально нільпотентна підалгебра із $W_3(\mathbb{K})$, яка має ранг 3 над R. Тоді за теоремою 1 отримаємо, що L ізоморфна одній із алгебр Лі L_1, L_2 або L_3. □

Зауважимо, що нільпотентні алгебри Лі диференціювань областей цілісності, які мають ранг 3 над цими областями вивчалися в [5].

Список використаних джерел

1. *Bavula V.V.* Lie algebras of traiangular derivations and an isomorphism criterion for their Lie factor algebras / Bavula V.V. // Izv. RAM. Ser. Mat., 2013, 77, 3-44.

2. *Makedonskyi Ie. O.* On nilpotent and solvable Lie algebras of derivations / Makedonskyi Ie. O., Petravchuk A.P. // Journal of Algebra, 2014, 401, 245-257.

3. *A. Nowicki* Polynomial derivations and their rings of constants / A. Nowicki // N.Copernicus University Press - 1994 - Torun.

4. *Petravchuk A.P.* On locally nilpotent Lie algebras of derivations of integral domains / Petravchuk A.P., Shevchyk O.M., Sysak K.Ya. // Appl. Problems of Mech. and Math., Pidstrygach Institute of Mathematics of NAS of Ukraine, 2017, **15**. – P.7-15.

5. *Petravchuk A.P.* On nilpotent Lie algebras of derivations of fraction fields / Petravchuk A.P. // Algebra and Discrete Math., (2016), v.22, no. 1, 118-131.

6. *T. Siebert* Lie algebras of derivations and affine algebraic geometry over fields of characteristic 0 / T. Siebert // Math. Ann, 305, (1996), 271–286.

7. *K. Ya. Sysak* On nilpotent Lie algebras of derivations with large center / K. Ya. Sysak // Algebra Discrete Math., 2016, **21**, 153–162.

References

1. BAVULA V.V. (2013) Lie algebras of traiangular derivations and an isomorphism criterion for their Lie factor algebras. Izv. RAM. Ser. Mat., **77**, pp.3-44

2. MAKEDONSKYI Ie. O., PETRAVCHUK A.P. (2014) On nilpotent and solvable Lie algebras of derivations. Journal of Algebra, **401**, pp.245-257.

3. NOWICKI A. (1994) "Polynomial derivations and their rings of constants N.Copernicus University Press, Torun.

4. PETRAVCHUK A.P., SHEVCHYK O.M., SYSAK K.Ya. (2017) On locally nilpotent Lie algebras of derivations, Appl. Problems of Mech. and Math., Pidstrygach Institute of Mathematics of NAS of Ukraine, **15**, pp.7-15.

5. PETRAVCHUK A.P. (2016) On nilpotent Lie algebras of derivations of fraction fields, Algebra and Discrete Math., v.22, no. 1, pp.118-131.

6. T. SIEBERT (1996) Lie algebras of derivations and affine algebraic geometry over fields of characteristic /,0, Math. Ann, **305**, pp.271–286.

7. K. YA. SYSAK (2016) On nilpotent Lie algebras of derivations with large center. Algebra Discrete Math., **21**, pp.153–162.

Received: 07.03.2017

ДИФЕРЕНЦІАЛЬНІ РІВНЯННЯ, МАТЕМАТИЧНА ФІЗИКА ТА МЕХАНІКА

УДК 004.42+612.1

Балабанов В. А., аспірант,
Кізілова Н. М., д. ф.-м. н., проф.

Моделі транспортних систем для рівномірного постачання рідини до заданого об'єму простору

Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна, 61022, м. Харків, пл. Свободи, 4
e-mail: lekarsenten@gmail.com

V. A. Balabanov, Postgraduate Student,
N. M. Kizilova, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.

Modeling of transport systems for uniform fluid delivery to a given volume of space

V. N. Karazin Kharkov National University, 61022, Kharkiv, Svobody sq., 4
e-mail: lekarsenten@gmail.com

Розглядається задача постачання рідини або газу до/від розподіленої системи споживачів/виробників, які займають безперервним чином деякий об'єм суцільного середовища, по розгалуженій системі трубок. Задача має безпосереднє відношення до систем транспорту рідини у сучасних електрохімічних паливних елементах, електрохімічних реакторів та подібних систем, які потребують високоточного рівномірного постачання газу та виводу рідини до/від пористого каталітичного шару, де відбуваються реакції. Аналогічні системи, такі як кровоносні, дихальні та інші трофічні провідні системи тварин та рослин, наявні в живій природі і їх дизайн може бути використано в технічних системах.

В роботі запропонована модель провідної системи у вигляді самоподібного бінарного дерева трубок, кути розгалужень якого відповідають умові мінімального гальмування течії на розгалуженнях. Отримані умови на діаметри та довжини трубок, які забезпечують рівномірний транспорт до кінцевих трубок дерева з мінімальними витратами енергії при заданому об'ємі системи. Показано існування двох типів розв'язків задачі.

Ключові слова: паливні елементи, транспорт рідини, бінарне дерево, оптимальні системи.

The problem of supply of a liquid or gas to/from a distributed system of consumers/producers, which occupy uniformly a given volume of continuous medium, through the branched system of tubes is considered. The problem is directly related to the fluid transportation systems in modern electrochemical fuel cells, electrochemical reactors and similar systems, which require highly uniform supply of gas and the withdrawal of liquid to/from the porous catalytic layer, where the reactions occur. Similar systems, such as the circulatory, respiratory and other trophic conductive systems in animals and plants, are presented in nature and their design can be used in technical systems.

In the paper, a model of the transportation system in the form of a self-similar binary tree of tubes whose branching angles correspond to the condition of minimal flow deceleration at the bifurcations is proposed. The conditions for the diameters and lengths of the tubes that provide uniform transport to the terminal pipes of the tree with minimal energy consumption at a given volume of the system are obtained. The existence of two types of solutions of the problem formulated is shown.

Key Words: Fuel cells, Fluid transport, Binary tree, Optimal systems.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Жук Я. О.

1. Вступ

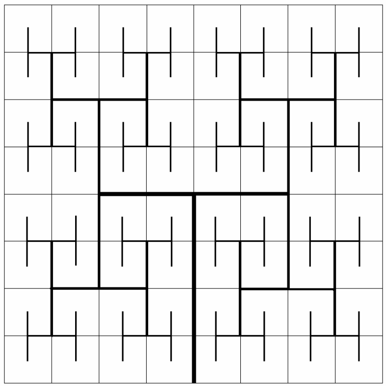
В технічних системах часто використовуються розгалужені транспортні системи для постачання рідини або газу до розподіленої системи споживачів – водо- і газопроводи, теплопроводи, дренажні системи, у тому числі на мікро- і нанорівні – для сучасних мікроелектромеханічних систем (MEMS), що використовуються як паливні елементи, мікродвигуни, електрохімічні або мікробіологічні реактори, лабораторії на чіпах та інші. В живій природі аналогічні системи використовуються для постачання газу в дихальних системах, крові – в системах кровообігу, трофічних рідин – для живлення тканин у тварин, рослинних соків – у рослин та багато інших. Головними принципами будови систем постачання в живій природі є мінімізація витрат енергії, завдяки чому такі системи задовольняють принципу мінімуму виробництва ентропії [1], а також рівномірного заповнення без самоперетинів деякого заданого об'єму простору [2-5]. В останній час інтерес до таких систем підвищився, зокрема, у зв'язку з необхідністю оптимізації дизайну систем постачання газу та виводу рідини з новітніх паливних елементів для електрокарів, велокарів та стаціонарних кімнатних електроприладів. В основі таких екологічно чистих паливних елементів лежать електрохімічні реакції з'єднання водню і кисню повітря з утворенням води та електричного потенціалу на електродах [6], або аналогічні паливні елементи, які працюють на метанолі.

В обидвох типах елементів відбувається перетворення хімічної енергії в електричну без проміжного утворення теплової енергії. Успішна робота паливного елементу потребує високоточного рівномірного розподілу палива та кисню в деякому об'ємі пористого шару, який заповнений наночастинками каталізатору. Зараз ціна водневих паливних елементів складає 500$ на 1 кВт енергії, але заплановано її зменшення до 50$ за рахунок всебічної оптимізації.

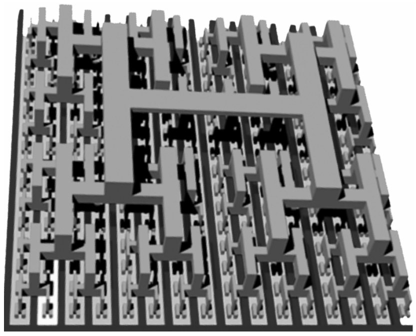
Для активних мембран в формі квадрата або прямокутника в паливних елементах використовуються змієподібні канали, які щільно заповнюють шар, паралельний до пористого шару, але такий дизайн не забезпечує рівномірного постачання палива та кисню і виводу води, що приводить до оклюзії каналів, нерівномірному навантаженню каталізатора та, як наслідок, нерівномірному нагріванню за рахунок екзотермічних хімічних реакцій, неефективній роботі, зниженню часу життя каталізатора та ряду інших небажаних фізико-хімічних процесів [7,8].

Запропонована та протестована велика кількість різних видів дизайну систем трубок для постачання газів та рідин з паралельною та сітчастою геометрією, у вигляді фракталів, кривій Гільберту, листів рослин та багато інших [7-9], але рівномірний розподіл зафіксовано тільки для фрактального дерева з кутом розгалужень $\alpha = \pi / 2$ (Рис.1а,б). Такий великий кут розгалужень значно гальмує рух газу та рідини, що викликає небажані витрати енергії.

Відомо, що в артеріальних та дихальних системах людини, тварин та рослин кути розгалужень транспортних елементів відповідають принципу мінімуму виробництва ентропії [1,10]. Розв'язок відповідної математичної постановки задачі оптимізації дає



а



б

Рис.1. Найпростіше бінарне дерево для рівномірного постачання рідини до кожного квадрату заданої поверхні в 2d (а) 3d (б) вигляді

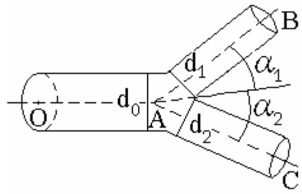


Рис. 2. Елементарна одиниця будови розгалуженого трубопроводу

залежності кутів розгалуження θ в біфуркації трубок з діаметрами d_0, d_1, d_2 (Рис.2) у вигляді [10]

$$\begin{aligned} \cos\alpha_1 &= ((1+\xi^\gamma)^{4/\gamma} + 1 - \xi^4) / (1+\xi^\gamma)^{2/\gamma} / 2, \\ \cos\alpha_2 &= ((1+\xi^\gamma)^{4/\gamma}\xi^4 - 1) / (1+\xi^\gamma)^{2/\gamma} / \xi^2 / 2, \end{aligned} \quad (1)$$

де $\xi = \min\{d_1, d_2\} / \max\{d_1, d_2\}$ – коефіцієнт асиметрії біфуркації, $\gamma = 3$.

При цьому діаметри судин в кожній біфуркації зв'язані між собою законом Мюрея [1-5, 10]:

$$d_0^\gamma = d_1^\gamma + d_2^\gamma. \quad (2)$$

Численні вимірюванні на живих системах показали, що $\gamma \in [2.55, 3.02]$ для артеріальних судин, $\gamma \in [2.76, 3.02]$ для вен, $\gamma \in [2.61, 2.91]$ для бронхіального дерева, $\gamma \in [2.89, 3.06]$ - для листів рослин [1-5,11].

Рівняння (1) забезпечують мінімальні витрати енергії на скрутах потоку на кути α_1, α_2 під час його розділення між трубками з d_1, d_2, а (2) відповідає оптимальній прямий трубці [11]. Було показано, що (1)–(2) є необхідними умовами локальної і глобальної оптимальності самоподібного бінарного дерева, яке забезпечує постачання рідини до або від розподіленої системи точок в просторі з мінімальними витратами енергії [1,10,11].

Кожний зі шляхів від вхідного перерізу до будь-якої кінцевої трубки вздовж фрактального трубопроводу (Рис.1) складається з аналогічних трубок 1-го, 2-го, … n-го порядку розгалуження, так що кожний шлях має однаковий опір, а тому і однакову витрату рідини, якщо на виході з кінцевих трубок підтримується однаковий тиск P^*. Аналогічні 3d системи постачання рідини були запропоновані в [12] (Рис.1б). На відміну від 2d систем, вони займають значно більший об'єм простору. Оскільки навіть 2d дизайн (Рис.1а) транспортної системи займає >60% маси та ~30% загальної вартості паливного елементу [6], то задача зменшення її об'єму стає найважливішою.

В даній роботі досліджуються несиметрично розгалужені трубопроводи у вигляді 2d бінарних дерев, які забезпечують рівномірне постачання та розподілення рідини з кутами розгалуження, близькими до оптимальних значень (1).

2. Математичне обґрунтування дизайну трубопроводів як бінарних дерев з постійним загальним опором вздовж довільного шляху

2.1. Випадок елементарної біфуркації.

Спочатку розглянемо біфуркацію, яка утворена трьома трубками (Рис.2). В перерізі О заданий вхідний тиск P_0, а на виході з біфуркації в перерізах B,C – вихідний тиск $P^* = const$. Вздовж трубок OA, AB, AC маємо стаціонарну ламінарну течію рідини, так що опір кожної трубки (з діаметрами $d_{0,1,2}$ та довжинами $L_{0,1,2}$) відповідає Пуазейлівському ($Z_j = kL_j / d_j^4$, $k = 128\mu/\pi$, μ - в'язкість рідини), так що

$$P_0 - P_1 = Q_0 Z_{01},\; P_1 - P^* = Q_1 Z_{12},\; P_1 - P^* = Q_2 Z_{13}, \quad (3)$$

де $Z_{01} = Z_{OA}$, $Z_{12} = Z_{AB}$, $Z_{13} = Z_{AC}$, P_1 - тиск в перерізі А (Рис.2), $Q_0 = Q_1 + Q_2$ - загальна об'ємна витрата течії.

З (3) легко отримати умову рівномірного постачання рідини (тобто $Q_1 = Q_2$) крізь несиметричне розгалуження ($L_1 \neq L_2, d_1 \neq d_2$) у вигляді:

$$Z_{12} = Z_{13} \;\Rightarrow\; L_1 / L_2 = (d_1 / d_2)^4. \quad (4)$$

Будемо вважати, що трубопровід є самоподібним, так що $L_1 / L_0 = b$, $L_2 / L_0 = b\zeta$, $b, \zeta = const$, а також що виконується (2), так що $d_1 = d_0 \Xi^{-1}$, $d_2 = d_0 \xi \Xi^{-1}$, $\Xi = \sqrt[\gamma]{1+\xi^\gamma}$. Тоді з (4) маємо

$$\zeta = \xi^4,\; L_2 < L_1. \quad (5)$$

Залежність (2) була отримана як розв'язок задачі оптимізації [10]

$$\dot{W} = Q^2 Z \to \min, \quad V = const, \quad (6)$$

де $\dot{W}$ - швидкість дисипації, V, Z, Q - загальний об'єм, гідравлічний опір та витрата рідини в системі.

Застосуємо (6) до системи з трьох трубок, і, з урахуванням (3)-(5), отримаємо

$$\begin{aligned} \dot{W}^\circ &= \dot{W}^\circ(b,\zeta,\xi,\gamma) \equiv 1 + \frac{b\zeta\Xi^4}{\zeta+\xi^4}, \\ V^\circ &= V^\circ(b,\zeta,\xi,\gamma) \equiv 1 + b\Xi^{-2}(1+\zeta\xi^2), \end{aligned} \quad (7)$$

де $\dot{W}^\circ \equiv \dot{W} / \dot{W}^*$, $V^\circ \equiv V / V^*$ - безрозмірні швидкість дисипації і об'єм, $\dot{W}^* = Q_0^2 k L_0 / d_0^4$, $V^* = \pi d_0^2 L_0 / 4$.

Тоді задача (6) у застосування до (7) зводиться до наступної системи рівнянь та умов:

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial x_j} = 0, \quad \frac{\partial^2 \tilde{W}}{\partial x_j \partial x_k} >> 0, \quad (8)$$

де $x_j = \{b, \zeta, \xi, \gamma\}$, остання умова відповідає додатній визаченості відповідної матриці похідних,

$$\tilde{W} \equiv 1 + \frac{\zeta\Xi^6(V^\circ - 1)}{(\zeta+\xi^4)(1+\zeta\xi^2)}.$$

2.2. Випадок кількох генерацій розгалужень.

Узагальнений випадок асиметричного бінарного дерева наведений на Рис.3а. Для відповідної нумерації (Рис.3б) вузлів та сторін самоподібного дерева з $d_{2n+1}/d_n = \Xi^{-1}$, $d_{2n+2}/d_n = \xi\Xi^{-1}$, $L_{2n+1}/L_n = b_n$, $L_{2n+2}/L_n = b_n\zeta$ (3) набуде вигляд:

$$P_{[n/2]} - P_{n+1} = Q_{n+1}Z_{n+1}, P_{n+1} - P_{2n+2} = Q_{2n+1}Z_{2n+2},$$
$$P_{n+1} - P_{2n+3} = Q_{2n+2}Z_{2n+3}, \quad Q_{n+1} = Q_{2n+1} + Q_{2n+2}, \qquad (9)$$

де $n = 0,...N$, $N = 2^k - 1$, k - число генерацій, $P_l = P*$ якщо $l = 2^{k-1},...,2^k - 1$ (Рис.3а).

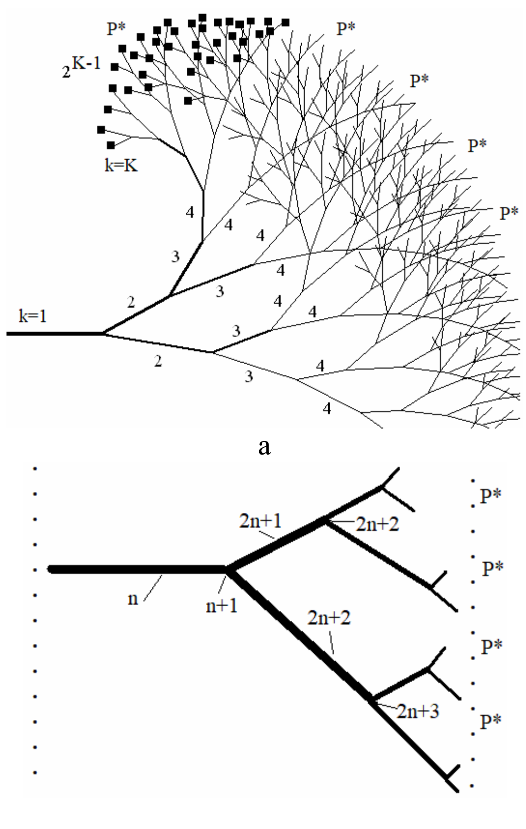


Рис.3. Схема бінарного дерева з нумерацією вузлів та гілок

Розв'язок лінійної системи рівнянь (9) дає значення всіх тисків у вузлах дерева та витрат рідини крізь відповідні трубки. Для витрат крізь 2^{k-1} трубок останньої генерації (позначені квадратами на Рис.3а) використаємо умови рівномірного постачання рідини $Q_{2^{k-1}} = Q_{2^{k-1}+1},..., Q_{2^k-1} = Q_0/(2^k - 2^{k-1})$.

За наявності останніх умов можливі два типу розв'язки системи (9):

1) Асиметричне бінарне дерево є самоподібним у сенсі рівномірного постачання рідини крізь трубки будь-якої генерації, тобто $Q_{1,2} = Q_0/2$, $Q_{3,4,5,6} = Q_0/4$ і т.д., якщо $b_1 = b_2 = ... = b_{2^k-1} \equiv b$, $\zeta = \xi^4$;

2) Дерево не є самоподібним і рівномірне постачання рідини має місце тільки крізь трубки останньої генерації, якщо $b_1 \neq b_2 \neq ... \neq b_{2^k-1}$, $\zeta \neq \xi^4$.

В першому випадку коефіцієнти b,ζ, необхідні для рівномірного постачання рідини, легко визначаються, а з умов оптимальності (7)-(8) можна знайти єдиний оптимальний набір значень b_{opt},ζ_{opt}. В другому випадку існує безліч наборів $\{b_j\}_{j=1}^{2^k-1}$, які залежать від параметрів V°, ξ, γ,ζ. Розв'язок задачі (6) не зможе виділити єдиний оптимальний набір, але двохпараметрична оптимізація надає можливість побудувати фронти Парето і вибрати потрібні розв'язки за допомогою додаткового критерію.

Наприклад, при $k = 3$ для витрат руху рідини по трубках $n = 4-7$ з (9) маємо:

$$Q_4 = \tilde{Z}_2\tilde{Z}_4Q_0, \quad Q_5 = \tilde{Z}_2\tilde{Z}_5Q_0, \quad Q_6 = \tilde{Z}_3\tilde{Z}_6Q_0,$$
$$Q_7 = \tilde{Z}_3\tilde{Z}_7Q_0, \quad \tilde{Z}_2 = \frac{Z_3 + Z_6\tilde{Z}_6}{Z_2 + Z_3 + Z_4\tilde{Z}_4 + Z_6\tilde{Z}_6},$$
$$\tilde{Z}_4 = \frac{Z_5}{Z_4 + Z_5}, \quad \tilde{Z}_5 = \frac{Z_4}{Z_4 + Z_5}, \quad \tilde{Z}_6 = \frac{Z_7}{Z_6 + Z_7},$$
$$\tilde{Z}_7 = \frac{Z_6}{Z_6 + Z_7}, \ \tilde{Z}_3 = \frac{Z_2 + Z_4\tilde{Z}_4}{Z_2 + Z_3 + Z_4\tilde{Z}_4 + Z_6\tilde{Z}_6}.$$

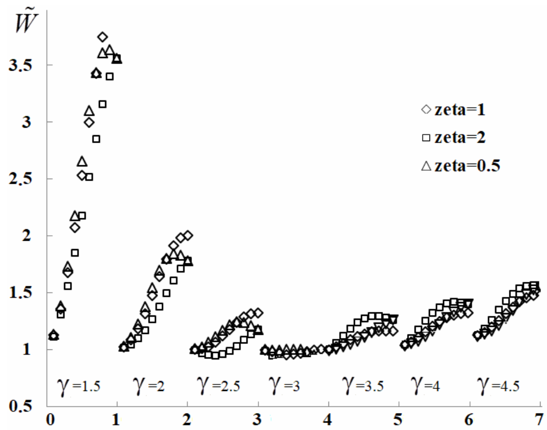
Звідси умова $Q_4 = Q_5 = Q_6 = Q_7$ еквівалентна рівнянням $\tilde{Z}_2\tilde{Z}_4 = \tilde{Z}_2\tilde{Z}_5 = \tilde{Z}_3\tilde{Z}_6 = \tilde{Z}_3\tilde{Z}_7$, простішим розв'язком яких є $Z_2 = Z_3$, $Z_4 = Z_5 = Z_6 = Z_7$, звідки $L_2/L_3 = (d_2/d_3)^4$ або $\zeta = \xi^4$, і такі ж сами відношення між діаметрами і довжинами у трубок 3-ї генерації, при чому значення ξ можуть бути різними у різних генерацій, але однакові для всіх трубок однієї генерації (перший випадок).

Після визначення геометрії системи можемо обчислити $\tilde{W}$ та розв'язати задачу оптимізації (8). Остаточні вирази не наведені в силу їх громіздкості. Чисельні розрахунки проводилися в широкому діапазоні значень параметрів $\xi \in]0;1]$, $\gamma \in [1;5]$.

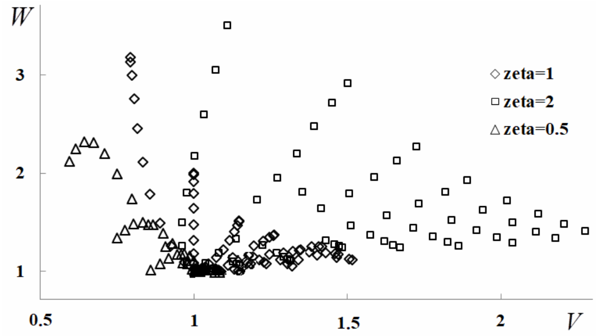
3. Результати чисельних розрахунків

Результати розрахунків $\tilde{W}(\zeta,\xi,\gamma)$ для різних значень параметрів наведені на Рис.4а для k=4. Вздовж горизонтальної осі $\xi \in [0.1;1]$ на кожному з діапазонів $\gamma = 1.5 - 4.5$. При постійному $V^{\circ} = 2$ безрозмірна функція $\tilde{W}$ досягає мінімуму при $\gamma = 3$ в широкому діапазоні коефіцієнтів асиметрії $\xi = 0.3 - 0.6$, а також при $\gamma = 2 - 3.5$ і $\xi = 0.1$. Останній випадок відповідає відгалуженням малих судин, коли головний потік іде крізь трубку з більшим діаметром і тому загальна дисипація менша при $b = const$. Таким чином, випадок $\gamma = 3$ є унікальним з точки зору оптимізації не тільки однієї трубки (2), але й біфуркації в цілому.

Аналогічні висновки можемо зробити з аналізу фронтів Парето $W(V)$ (Рис.4б). Для кожного фіксованого значення V найменші значення W досягаються при $\gamma = 3$ для майже симетричних розгалужень з $\xi = 0.4 - 0.6$ та $\xi = 0.5 - 1$, що дає можливість використати для будови бінарного дерева значення кутів розгалужень, близьких до оптимальних (1).



а



б

Рис.4. Залежності $\tilde{W}(\zeta,\xi,\gamma)$ (а) і $W(V)$ (б)

7. Висновки

В роботі запропонована нова модель асиметричного бінарного дерева трубок, яке забезпечує рівномірне постачання в'язкої рідини або газу до розподіленої системи споживачів, які займають деякий об'єм простору. На відміну від найпростішої моделі фрактального дерева (Рис.1), така модель забезпечує менші витрати енергії за рахунок близьких до оптимальних кутів розгалуження трубок. Запропонований підхід дозволяє оптимізувати також довжини трубок в кожній генерації и будувати провідні системи, які при тому ж самому загальному об'ємі забезпечують меншу дисипацію енергії. Подібні транспортні системи є перспективними для використання в паливних елементах та інших системах, що вимагають високої однорідності постачання і розподілення маси по об'єму заданої форми та розмірів.

Список використаних джерел

1. Gheorghiu S. Is the Lung an Optimal Gas Exchanger? / S. Gheorghiu, S. Kjelstrup, M.-O. Coppens. In: Fractals in Biology and Medicine, eds. G. Losa, D. Merlini, Th.F. Nonnenmacher. – 2005. – P. 31–42.
2. Балабанов В. О. Математичне моделювання артеріальних систем як бінарних дерев, які заповнюють об'єм простору / В.О. Балабанов, Н.М. Кізілова // Вісник КНУ ім. Тараса Шевченка. Сер.: Фізико-математичні науки. - 2015. - Спецвипуск. - С.27-32.
3. Балабанов В.А. Новый алгоритм построения оптимальных транспортных систем, заполняющих заданную область / В.А. Балабанов, Н.Н. Кизилова. // Механика.

References

1. GHEORGHIU, S., KJELSTRUP, S., COPPENS, M.-O. (2005) Is the Lung an Optimal Gas Exchanger? In: *Fractals in Biology and Medicine*, eds. G. Losa, D. Merlini, Th.F. Nonnenmacher. p. 31–42.
2. BALABANOV, V.A., KIZILOVA, N.M. (2015) Mathematical modeling of arterial systems as the volume filling binary trees. *Visnyk of T. Shevchenko Kyiv National Univ., ser. Physics and mathematics sciences*. Special Issue. p. 27–32.
3. BALABANOV, V.A., KIZILOVA, N.M. (2016) A new algorithm of building of the optimal transport systems filling a given area. In: *Mechanics. Research and Innovations*. Vol.3. Gomel Univ. Press. p.18–26.
4. BALABANOV, V.A., KIZILOVA, N.M. (2017)

Исследования и инновации. Вып. 9. Гомель. - 2016. – С.18-26.

4. Балабанов В.О. Математичне моделювання стаціонарної та хвильової провід-ності артеріальних систем як бінарних дерев / В.О. Балабанов, Н.М. Кізілова // Вісник КНУ ім. Т. Шевченка. Сер.: Фізико-математичні науки. – 2017. – N3. – С.19-23.
5. Балабанов В.А. Математическое моделирование и 3D визуализация бинарных деревьев с минимумом самопересечений / В.А. Балабанов, Н.Н. Кизилова // Вісник ХНУ ім. В.Н. Каразіна, сер. «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». - 2017. - т.34. - С.5-17.
6. Kjelstrup S. Non-Equlibrium Thermodynamics of Heterogenous Systems / S. Kjelstrup, D. Bedeaux. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., 2nd ed. - 2008. – 198 p.
7. Kjelstrup S. Nature inspired energy- and material-efficient design of a polymer electrolyte membrane fuel cell / S. Kjelstrup, M.-O. Coppens, J. G. Pharoah // Energy Fuels. – 2010. – v. 24. – P. 5097–5108.
8. Tüber K. Investigation of fractal flow-fields in portable proton exchange membrane and direct methanol fuel cells / K.Tüber, A. Oedegaard, M. Hermann // J. Power Sources. – 2004. – v. 131. – P. 175-181.
9. Arvay A. Nature inspired flow field designs for proton exchange membrane fuel cell / A. Arvay, J. French, J.C. Wang, X.H. Peng, A.M. Kannan. // Int. J. Hydrogen Energy. – 2013. – v.38. – P. 3717–3726.
10. Розен Р. Принцип оптимальности в биологии / Р. Розен. – Москва: Мир, 1968. – 212 с.
11. Kizilova N.N. Computational approach to optimal transport network construction in biomechanics / N.N. Kizilova. // Lecture Notes in Computer Science. – 2004. - Vol.3044. – P.476-485.
12. Trogadas P. A lung-inspired approach to scalable and robust fuel cell design / P.Trogadas, J.I.S. Cho, T.P. Neville, J. Marquis, B. Wu, D.J.L. Brett, M.-O. Coppens. // Energy Environ. Sci. - 2018. – v. 11. – P. 136-143.

Mathematical modeling of steady and wave conductivity of arterial systems as binary trees. *Visnyk of T. Shevchenko Kyiv National Univ., ser. Physics and mathematics sciences*. N3. p. 19–23.

5. BALABANOV, V.A., KIZILOVA, N.M. (2017) Mathematical modeling and 3D visualization of binary trees with minimum self cross-sections. *Visnyk of V.N. Karazin Kharkiv National Univ., ser. Mathematical modeling. Inform.technologies. Automated control systems*. 34. p. 5–17.
6. KJELSTRUP, S., BEDEAUX, D. (2008) *Non-equilibrium Thermodynamics of Heterogeneous Systems*. N.-Y.: World Sci. Pub.
7. KJELSTRUP, S., COPPENS, M.-O., J. PHAROAH, G., PFEIFER, P. (2010) Nature inspired energy- and material-efficient design of a polymer electrolyte membrane fuel cell. *Energy Fuels*. 24. p. 5097–5108.
8. TÜBER, K, OEDEGAARD, A, HERMANN, M, HEBLING, C. (2004) Investigation of fractal flow-fields in portable proton exchange membrane and direct methanol fuel cells. *J. Power Sources*. 131. p. 175–181.
9. Arvay, A, French, J, Wang, J.C., et al. (2013) Nature inspired flow field designs for proton exchange membrane fuel cell. *Int. J. Hydrogen Energy*. 38. p. 3717–3726.
10. ROZEN, R. (1968) *Printsip Optimalnosti v Biologii*. Moskva: Mir.
11. KIZILOVA, N.N. (2004) Computational approach to optimal transport network construction in biomechanics. Lecture Notes Computer Sci. 3044. p. 476–485.
12. TROGADAS, P., CHO, J.I.S., NEVILLE, T.P., et al. (2018) A lung-inspired approach to scalable and robust fuel cell design. Energy Environ. Sci. 11. p. 136–143.

Надійшла до редколегії 27.08.18

УДК 532.529+577

Баранець В. О., інженер,
Кізілова Н. М., д. ф.-м. н., проф.

Дослідження течій мікро/нанорідин між двома рухомими циліндрами

[1]Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Харків, Україна,
e-mail: cherevko.vita@gmail.com
[2]Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна, Харків, пл. Свободи, 4,
e-mail: kizilova@univer.kharkov.ua

V. O. Baranets, engineer,
N. M. Kizilova, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.

Study of micro/nanofluidic flows between two rotating cylinders

[1]V.N. Karazin Kharkiv National University, 61022, Kharkov, Svobody sq., 4,
e-mail: cherevko.vita@gmail.com
[2]V.N. Karazin Kharkov National University, 61022, Kharkov, Svobody sq., 4,
e-mail: kizilova@univer.kharkov.ua

Експериментальні вимірювання показали, що стаціонарні ламінарні течії мікро- і нанорідин по мікроканалам різної форми виконаних із різних матеріалів характеризуються залежностями об'ємної витрати Q від перепаду тиску dP на кінцях каналу, що перевищують відповідні Пуазейлівські залежності для каналів тієї ж форми на 30-70%, що пов'язано з особливостями взаємодії мікро/нанорідин зі стінками каналів. Для урахування дифузійного розсіювання та тангенціального переносу частинок мікро- і нанорідин на стінках, шорсткість яких порівняна з розміром частинок та довжиною їх вольного перебігу введені граничні умови прослизання першого та другого порядку, які дозволяють достатньо точно описувати експериментально виміряні залежності Q(dP). В роботі розглядається ламінарна течія трьох шарів рідини між двома коаксіальними циліндрами, що обертаються з різними кутовими швидкостями. Шари можуть відповідати трьом незмішуваним рідинам з різними властивостями, або мікро/наносуспензії з різними концентраціями частинок за рахунок пристінних ефектів. Отримано аналітичний розв'язок задачі, розраховані значення об'ємної витрати та напруження тертя на стінках. Показано, що за рахунок вибору параметрів рідини та матеріалу циліндричних поверхонь можна отримати течії з суттєво зниженим або підвищеним тертям на стінках, що можна використати для різних задач прикладної мікрофлюідики – змішування рідин або розділення сумішей.

Ключові слова: мікрофлюідика, нанофлюідика, течія між коаксіальними циліндрами, незмішувані рідини.

Experimental measurements have shown that stationary laminar flows of micro- and nanofluids in the microchannels of various shapes and materials are characterized by the dependence of the flow rate Q on the pressure difference dP along the channel, which exceeds the corresponding Poiseulle dependencies by 30-70% due to the peculiarities of the interaction of the micro/nanofluids with the walls. In order to take into account the diffusion scattering and tangential transfer of the micro- and nanoparticles on the walls which roughness is comparable to the size of the particles and their free path length, the velocity slip boundary conditions of the first and second order had been introduced, which allows adequate description of the experimentally measured Q(dP) curvess. Here the laminar flow of three fluid layers between two coaxial cylinders rotated at different angular velocities is studied. The layers may correspond to three immscible fluids with different properties, or to the micro/nano-suspensions with different particle concentrations due to wall effects. An analytical solution of the problem is obtained; the flow rate and viscous stress at the walls are calculated. It is shown that by the choice of the material parameters of the fluids and cylinders, the flows with substantially reduced or elevated wall frictions can be obtained. It can be used for the micro/nanofluidic applications as fluid mixing or separation.

Key Words: microfluidic, nanofluidics, flow between coaxial cylinders, immobilized liquids.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Жук Я. О.

1. Вступ

В багатьох експериментальних дослідженнях течій суспензій мікрочастинок (клітин, біополімерів) або наночастинок Al_2O_3, CuO, SiO_2, ZnO була показана невідповідність теоретичними розрахунками, проведеними на основі класичних моделей механіки суспензій [1,2]. Так, було показано, що при течії рідин по мікроканалам з діаметрами $D_h = 5;12;25$ мкм коефіцієнт тертя на 5-30% вище, ніж розрахований на підставі рівнянь Нав'є-Стокса для рідин з тими ж щільністю і в'язкістю [3]. Відхилення від класичної теорії залежить від концентрації, матеріалу та форми частинок, температури, числа Рейнольдса та ін. Аналогічні результати були отримані для різних рідин, розміру та форми каналів, властивостей їх стінок [4,5]. Зі збільшенням відносної шорсткості стінок до 5% для підтримки Пуазейлівської течії в мікроканалі необхідний перепад тиску на 65% вищий, ніж передбаченого формулою Пуазейля.

Як було показано в останні роки, основна причина розбіжностей пов'язана з наявністю прослизання частинок мікро- і нанорідин на стінках микроканалов, розміри шорсткостей яких не є малими у порівнянні з розмірами частинок та величиною їх вільного пробігу в базовій рідині [1,2]. Оскільки наступним часом спостерігається інтерес до нано- і біотехнологій, які використовують течії досліджуваних рідин по мікротрубках і каналах різної форми, особливості руху та ступінь невідповідності класичній теорії рідини становить значний практичний інтерес.

2. Математичні постановки задач для течій в мікро/наноканалах.

Якщо довжина вільного пробігу λ частинок порівняна з шириною каналу h, так що число Кнудсена Kn> 0.01, при взаємодії частинок з шорсткістю стінки частинки набувають додатковий імпульс уздовж стінки за рахунок дифузного віддзеркалення [1,2]. Таким чином, швидкість частинок рідини при цьому відрізняється від швидкості стінки, і умова прилипання не виконується.

В даний час в мікро/нанофлюідіке показана коректність використання умов прослизання першого (для мікрорідин) і другого (для нанорідин) порядків, запропоновані раніше для течій розріджених газів, у вигляді

$$\left(u - u_w - aKn\frac{\partial u}{\partial n} - bKn^2\frac{\partial^2 u}{\partial n^2} \right)\Bigg|_{\Gamma} = 0 , \quad (1)$$

де u - аксіальна компонента швидкості рідини, Γ, u_w, n - границя каналу, швидкість її руху та нормаль, $a = (2-\sigma)/\sigma$, σ - тангенціальний переніс імпульсу на стінці, $b = const$, причому з данніх експериментів $a \in [1;1.1466]$, $b \in [0.5;1.309]$ [2]. Умова (1) отримана шляхом розкладання швидкості рідини в ряд Тейлора з точністю до похідних другого порядку.

Умова (1) використовується в діапазоні чисел Кнудсена $0.1 < Kn \le 1$, що відповідає нанорідинам. Для $0.01 < Kn \le 0.1$ можна вважати в (1) b=0. – це умова прослизання першого порядку, яка виконується для мікрорідин. При $Kn < 0.01$ умови прилипання на стінці дають добру відповідність теорії експерименту [1,2].

Хоч на нанорівні параметри течій, їх механічні, теплові, електромагнітні та інші властивості залежать од розміру (наночастинок, наноканалів тощо), квантові феномени не проявляють себе і течії рідин добре описуються як методами динаміки частинок (молекулярної динаміки), так і рівняннями Нав'є-Стокса [1,2]. Велика кількість публікацій присвячена дослідженню відмінностей гемодинамічних параметрів класичних рідин та мікро/нанорідин в зв'язку з особливостями гранічних умов, розсіюванні тепла на шорстких стінках та інших узагальненнях класичних постановок задач гідромеханіки. Отримані узагальнення течій Пуазейля по трубкам кругового, прямокутного та ін. перерізів [2], в тому числі для неоднорідних стінок [6].

Дослідження впливу умов прослизання (1) на параметри течій мікро/наносуспензій має велике значення методів віскозиметрії, особливо при вимірюваннях на малорозмірних краплях речовин. Відомо, що проблемою віскозиметричних вимірювань є вплив ефекту Фареуса-Ліндквіста, який вносить значні похибки в теоретичні формули для розрахунку ефективної в'язкості [6].

В даній роботі досліджується розв'язок задачі про стаціонарну течію суспензії мікро/наночастинок між двома коаксіальними циліндрами, що обертаються з різними швидкостями і мають різні властивості поверхонь. Враховується утворення поблизу стінок шарів рідини з різними властивостями (концентрацією частинок, в'язкістю та ін.).Така задача також відповідає ламінарній течії незмішуваних рідин. Аналогічний розв'язок раніше був отриманий для ламінарної течії Куета мікро/нанорідин між паралельними пластинами

[7]. Було показано [7], що за рахунок підбору параметрів незмішуваних рідин можна отримати течію з меншими витратами енергії при тих самих об'ємних витратах рідини, що можна використовувати в мікро/нанорідинних пристроях [8], а пристінні шари виконують роль змащувальних і прискорюють течію в каналі та знижують тертя на стінках за рахунок тангенціального переносу імпульсу мікро/нано частинками на мікро/наношорстких стінках.

3. Математична постановка та рішення задачі про течію між коаксіальними циліндрами, що обертаються з різною частотою

Два коаксіальних циліндри з віссю 0z радіусами R_1 і R_2 обертаються з кутовими швидкостями Ω_1 і Ω_2 ($\Omega_2 > \Omega_1$) (Fig.1). Між циліндрами знаходяться три шари нестисливої рідини з різними змістом мікро/ наночастинок товщинами h_1, h_2, h_3, причому $h_1 + h_2 + h_3 = R_2 - R_1$ і в'язкостями $\mu_{1,2,3}$. Рух рідин описується стаціонарними рівняннями Нав'є-Стокса в циліндричних координатах з умовами (1) на поверхнях $r = R_1$ і $r = R_2$, а також умовами безперервності швидкості та напружень:

$$r = R_1 : \; v^1 - \Omega_1 R_1 - \alpha_1 \frac{dv^1}{dr} + \beta_1 \frac{d^2 v^1}{dr^2} = 0 , \qquad (2)$$

$$r = R_1 + h_1 : \; v^1 = v^2, \quad \mu_1 \frac{\partial v^1}{\partial r} = \mu_2 \frac{\partial v^2}{\partial r} , \qquad (3)$$

$$r = R_1 + h_1 + h_2 : \; v^2 = v^3, \quad \mu_2 \frac{\partial v^2}{\partial r} = \mu_3 \frac{\partial v^3}{\partial r} , \qquad (4)$$

$$r = R_2 : \; v^3 - \Omega_2 R_2 - \alpha_2 \frac{dv^3}{dr} + \beta_2 \frac{d^2 v^3}{dr^2} = 0 , \qquad (5)$$

де $v^{1,2,3}$ - швидкості течії рідини в шарах, $\alpha_{1,2} = a_{1,2} Kn$, $\beta_{1,2} = b_{1,2} Kn^2$.

За звичайними умовами непрослизання рідини на поверхні та при $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$ розв'язок цієї задачі має вигляд [1,6]:

$$v_\theta(r) = \frac{\Omega_2 R_2^2 - \Omega_1 R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} r - \frac{(\Omega_2 - \Omega_1) R_1^2 R_2^2}{R_2^2 - R_1^2} \frac{1}{r} , \qquad (6)$$

а напруження тертя на стінках

$$\tau = \mu \left(\frac{\Omega_2 R_2^2 - \Omega_1 R_1^2}{R_2^2 - R_1^2} + \frac{(\Omega_2 - \Omega_1) R_1^2 R_2^2}{R_2^2 - R_1^2} \frac{1}{r^2} \right) \qquad (7).$$

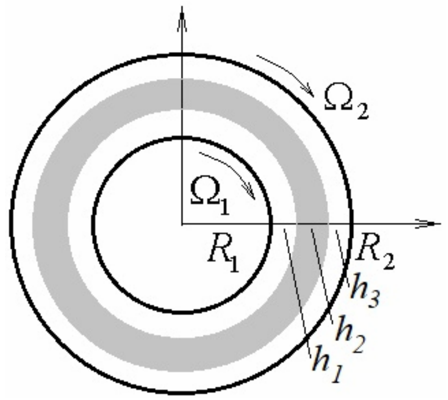


Рис.1. Ламінарна течія трьох шарів незмішуваних рідин між двома рухомими циліндрами.

Для однорідного шару рідини ($\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$) та наявності умов прослизання (2), (5) розв'язок задачі був отриманий в [6] у вигляді

$$v_\theta^{slip}(r) = \frac{\Omega_2 R_2^4 A_1 - \Omega_1 R_1^4 A_2}{R_2^3 (R_2 - \alpha_2) A_1 - R_1^3 (R_1 - \alpha_1) A_2} r - \frac{\Omega_2 R_1^3 R_2^4 (R_1 - \alpha_1) - \Omega_1 R_1^4 R_2^3 (R_2 - \alpha_2)}{R_2^3 (R_2 - \alpha_2) A_1 - R_1^3 (R_1 - \alpha_1) A_2} \frac{1}{r} , \qquad (8)$$

$$\tau^{slip}(r) = \mu \left(\frac{\Omega_2 R_2^4 A_1 - \Omega_1 R_1^4 A_2}{R_2^3 (R_2 - \alpha_2) A_1 - R_1^3 (R_1 - \alpha_1) A_2} + \frac{\Omega_2 R_1^3 R_2^4 (R_1 - \alpha_1) - \Omega_1 R_1^4 R_2^3 (R_2 - \alpha_2)}{R_2^3 (R_2 - \alpha_2) A_1 - R_1^3 (R_1 - \alpha_1) A_2} \frac{1}{r^2} \right) , \qquad (9)$$

де $A_{1,2} = R_{1,2}^2 + \alpha_{1,2} R_{1,2} - \beta_{1,2}$.

Тому розв'язок неоднорідної задачі з умовами (2)-(5) розшукувався в аналогічному вигляді

$$v^j(r) = C_{j1} r + C_{j2} \frac{1}{r} , \qquad (10)$$

де C_{j1}, C_{j2} - постійні інтегрування, які знаходимо із умов (2)-(5) у вигляді:

$$C_{21} = \frac{1}{\Delta} \left(B_1 \Delta_{23}^- - B_2 \Delta_{21}^- \right) , \; C_{22} = \frac{1}{\Delta} \left(B_2 \Delta_{21}^+ - B_1 \Delta_{23}^- \right) ,$$

$$C_{11} = \mu_{21}^+ C_{21} + \frac{\mu_{21}^-}{2(R_1^+)^2} C_{22} , \; C_{12} = \frac{\mu_{21}^-}{2(R_1^+)^2} C_{21} + \mu_{21}^+ C_{22} ,$$

$$C_{31} = \mu_{23}^+ C_{21} + \frac{\mu_{23}^-}{2(R_2^+)^2} C_{22} , \; C_{32} = \frac{\mu_{23}^-}{2(R_2^+)^2} C_{21} + \mu_{22}^+ C_{22} ,$$

$$\Delta_{21}^+ = \mu_{21}^+ + \frac{A_1 \mu_{21}^- (R_1^+)^2}{R_1^- R_1^3} , \; \Delta_{21}^- = \frac{\mu_{21}^-}{2(R_1^+)^2} + \frac{A_1 \mu_{21}^+}{R_1^- R_1^3} ,$$

$$\Delta_{23}^+ = \mu_{23}^+ + \frac{A_2 \mu_{23}^- (R_2^+)^2}{R_2^- R_2^3} , \; \Delta_{23}^- = \frac{\mu_{23}^-}{2(R_2^+)^2} + \frac{A_2 \mu_{23}^+}{R_2^- R_2^3} ,$$

$\Delta = \Delta_{21}^{+}\Delta_{23}^{-} - \Delta_{23}^{+}\Delta_{21}^{-}$, $B_1 = \dfrac{\Omega_1 R_1}{R_1^{-}}$, $B_2 = \dfrac{\Omega_2 R_2}{R_2^{-}}$,

$\mu_{21}^{\pm} = (1 \pm \mu_2 / \mu_1)/2$, $\mu_{23}^{\pm} = (1 \pm \mu_2 / \mu_3)/2$,

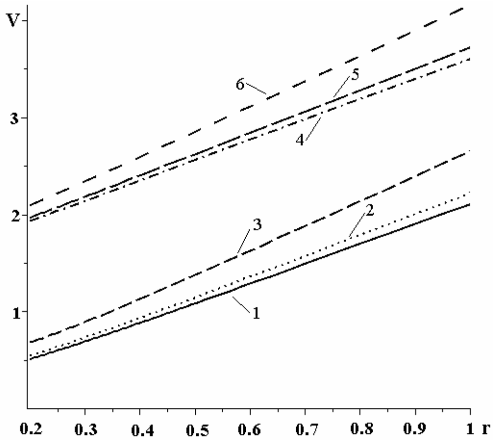
$R_{1,2}^{-} = R_{1,2} - \alpha_{1,2}$, $R_1^{+} = R_1 + h_1$, $R_2^{+} = R_1^{+} + h_2$.

У випадку $\mu_1 = \mu_2 = \mu_3$ ці вирази переходять в (8). Для дослідження впливу коефіцієнтів прослизання, швидкостей обертання, в'язкостей рідин та геометрії системи проводилися безпосередні розрахунки профілю швидкостей та тертя на стінках для течії не змішуваних рідин у порівнянні з однорідною течією рідини, яка знаходилась у внутрішньому шарі (з в'язкістю μ_2), а також у припущенні малої товщини пристінних шарів (тобто $h_{1,2} << R_2 - R_1$.

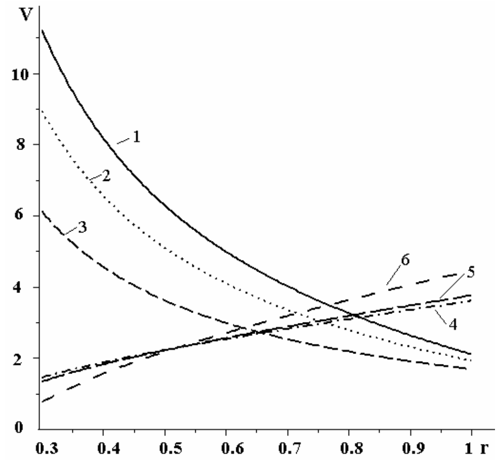
4. Результати та обговорення чисельних розрахунків

Чисельні розрахунки залежностей $v^{1-3}(r)$ наведені на Рис.2-3 в безрозмірних змінних: $r^{\circ} = r / R_2$, $v^{\circ} = v / \mathrm{v}^{*}$, $\mathrm{v}^{*} = (\Omega_1 + \Omega_2)/(\mathrm{R}_1 + R_2)$, де $r^{\circ} \in [r_1, 1]$, $r_1 = R_1 / R_2$ при тих самих наборах значень параметрів, які відповідають різним мікро- і нанорідинам використовувалися при дослідженнях течій Куета незмішуваних рідин між паралельними поверхнями [8].

Для різних наборів параметрів перший складник в (10) лінійний по r і може мати вклад як порівняний з другим складником (зворотнім по r), так і значно більший або менший. В залежності від того відповідне розподілення швидкості між циліндрами може бути лінійним, гіперболічним, або змішаним. На Рис. 2а наведений приклад лінійного розподілення, а на Рис.2б – гіперболічного (криві 1-3) і змішаного (криві 4-6). У всіх випадках швидкість зростає у напрямку до зовнішньої поверхні.

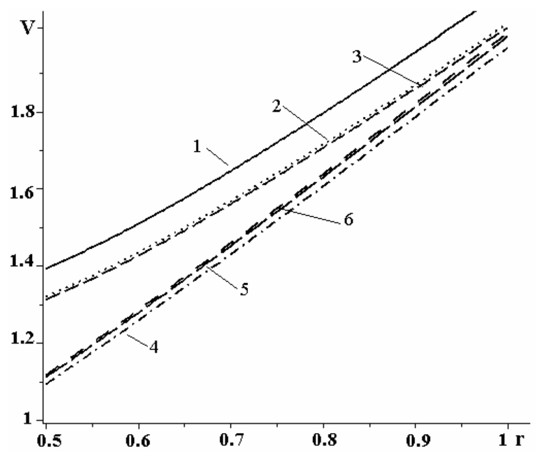


а

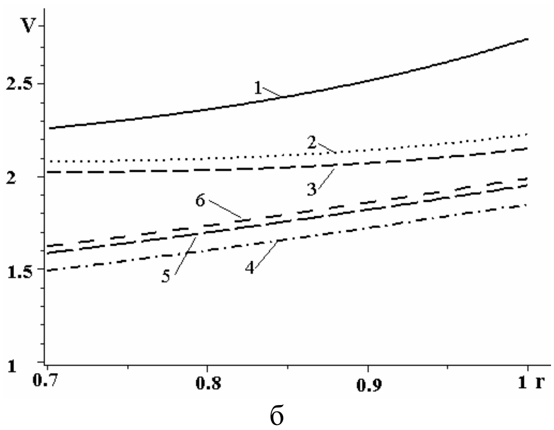


б

Рис.2. Безрозмірні залежності $v(r)$ при r_1=0.2 (а) і r_1=0.3 (б), $\beta_{1,2} = 0$; криві 1-6 відповідають (α_1, α_2) = $\{(0.05, 0.05)$, $(0.05, 0.1)$, $(0.05, 0.5)$, $(0.1, 0.05)$, $(0.1, 0.1)$, $(0.1, 0.5)\}$.



а



б

Рис.3. Безрозмірні залежності $v(r)$ при r_1=0.5 (а) і r_1=0.7 (б), $\alpha_{1,2} = 0.1$; криві 1-6 відповідають (β_1, β_2) = $\{(0.05, 0.05)$, $(0.05, 0.1)$, $(0.05, 0.5)$, $(0.1, -0.05)$, $(0.1, -0.1)$, $(0.1, -0.5)\}$.

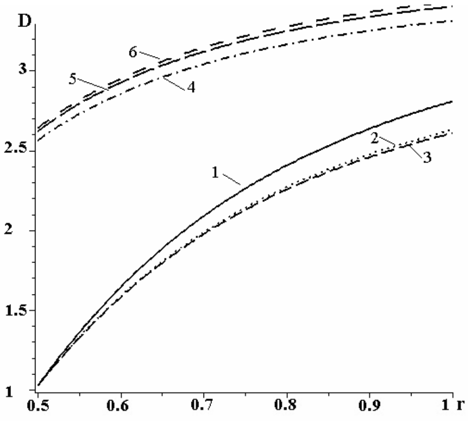


Рис.4. Безрозмірні залежності $D(r)$ (позначення як на Рис.3).

Зі зростанням величини прослизання першого порядку $\alpha_{1,2}$ при заданих $\beta_{1,2}$ та фіксованих інших параметрах моделі швидкість монотонно зростає, що відповідає даним експериментів [1,2]. Залежності, представлені на Рис.2, були обчислені при $\beta_{1,2}=0$, тобто для мікрорідин, але східні закономірності при змінах $\alpha_{1,2}$ спостерігаються і для нанорідин (тобто $\beta_{1,2}\neq 0$). Вплив параметрів $\beta_{1,2}$ при заданих $\alpha_{1,2}$ не є таким однозначним (Рис.3а,б). Оскільки, відповідно до [2], $\beta_{1,2}$ можуть мати різні знаки (див. вище), чисельне моделювання проводилось в широкому діапазоні значень параметрів задачі, в тому числі при $\beta_{1,2}<0$. Типові результати обчислень наведені на Рис.3а,б. Залежність швидкості від координати залишається монотонною, але вплив $\beta_{1,2}$ стає значнішим поблизу відповідної поверхні $R_{1,2}$. При $\beta_{1,2}<0$ зі зростанням β_1 при заданому β_2 або зі зростанням β_2 при заданому β_1 відповідні залежності $v(r)$ зсуваються у напрямку від відповідної поверхні (R_1 або R_2), Рис.3а. Коли значення β у однієї з поверхонь змінюють знак, спостерігається зворотній ефект (Рис.3б), оскільки значення $\beta_{1,2}$ впливають на кривизну профілю швидкості в пригpаничних шарах рідини [1,2]. Складний характер має теж розподілення в'язкої дисипації $D=\mu\left(v_\theta'(r)\right)^2$ (Рис.4), яка визначає ефективність приладу.

При течіях однорідних мікро/нанорідин для певних наборів параметрів $\alpha_1,\alpha_2,\beta_1,\beta_2$ значення швидкостей рідини на стінках циліндрів

$$v_\theta^{slip}(R_{1,2})=\frac{\Omega_{1,2}R_{1,2}^3(R_{2,1}^2(R_2^2-R_1^2)\mp\alpha_{2,1}R_{2,1}(R_1^2+R_2^2)}{R_2^3(R_2-\alpha_2)A_1-R_1^3(R_1-\alpha_1)A_2}\pm$$
$$\pm\frac{2\beta_{2,1}R_{1,2}^2)+2\Omega_{2,1}R_{1,2}R_{2,1}^4(\alpha_{1,2}R_{1,2}-\beta_{1,2})}{R_2^3(R_2-\alpha_2)A_1-R_1^3(R_1-\alpha_1)A_2}$$

стають більшими ніж в (6) ($v_\theta^{slip}(R_{1,2})>\Omega_{1,2}R_{1,2}$) а напруження тертя на стінках

$$\tau^{slip}(R_{1,2})=\mu\frac{\begin{pmatrix}(\Omega_2R_2^4A_1-\Omega_1R_1^4A_2)R_{1,2}^2+\\+\Omega_2R_1^3R_2^4(R_1-\alpha_1)-\Omega_1R_1^4R_2^3(R_2-\alpha_2)\end{pmatrix}}{(R_2^3(R_2-\alpha_2)A_1-R_1^3(R_1-\alpha_1)A_2)R_{1,2}^2}$$

- меншими ніж обчислені за (7), що відповідає відомому ефекту прослизання [1,2]. Аналогічні обчислення за формулами (10) показали, що аналогічно можна впливати на течії незмішуваних рідин.

Використовуючи цю закономірність, ефективні мікро/нанорідинні пристрої з низькими або високими напруженнями тертя на стінках можуть бути запроектовані за рахунок використання відповідних за властивостями рідин та матеріалів циліндричних поверхонь.

5. Висновки

В роботі запропонована модель, що узагальнює класичну задачу про ламінарну течію в'язкої рідини між коаксіальними циліндрами, які обертаються з різними швидкостями, на випадок мікро- або нанорідин з урахуванням умов прослизання швидкості першого та другого порядків відповідно (1), а також наявності шарів незмішуваних рідин з різними в'язкостями або однієї суспензії мікро/наночастинок з різними концентраціями за рахунок взаємодії частинок з шорстким стінками (2). Показано, що, завдяки великій кількості параметрів, динамічна поведінка системи стає складною і немонотонною. Спостерігаються лінійний, гіперболічній та змішані профілі поля швидкостей, а вплив коефіцієнтів прослизання може викликати зміни монотонності, градієнту швидкості на тертя на стінках. За рахунок певного вибору параметрів шорсткості стінки, в'язкості рідини, товщин пригpаничних шарів та ін. можна контролювати механічні процеси в системі, а саме прискорювати швидкість, її градієнт, напруження тертя, в'язку дисипацію поблизу однієї стінки та(або) зменшувати – на іншій, змінює режими та результати роботі відповідних мікро/нанорідинних пристроїв, в яких рідини рухаються між циліндричними поверхнями.

Список використаних джерел

1. *Karniadakis G.E., Beskok A., Aluru N.* Microflows and nanoflows: Fundamentals and simulation // Interdisc. Appl. Math. Series, V.29. - 2005. - P.51-77.
2. *Gad-el-Hak M.* MEMS Introduction and fundamentals // The MEMS Hand-book, Second ed., Taylor & Francis Group, LLC. - 2006.
3. *Liou W., Fang Y.* Microfluid Mechanics: Principles and Modeling (Nanoscience and Technology) // McGraw-Hill Education Publ. - 2005.
4. Microfluidics and BioMEMS Applications, F.E.H. Tay (Ed.) // Springer-Science - 2002.
5. *Sidik N.A.C., Mohammed H.A. , Alawi O.A., Samion S.* A review on preparation methods and challenges of nanofluids // Intern. Communic. Heat Mass Transfer. - 2014. – 54.- P.115–125.
6. *Cherevko V., Kizilova N.* Complex flows of immiscible microfluids and nanofluids with velocity slip bounary conditions // Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications, Springer Proceedings in Physics , vol. 183 - O. Fesenko, L. Yatsenko (eds.). – 2017. – P. 207–230.
7. MEMS Microfluidics for Lab-on-a-Chip Applications // Microelectromechanical Systems and Devices, N.Islam (Ed.) – InTech - 2012.
8. *Черевко В.А., Кизилова Н.Н.* Моделирование ламинарного течения несмешивающихся суспензий микро- и наночастиц в микроканалах. // Механика. Исследования и инновации. Вып. 9. Гомель. - 2016. – С.47-54.

References

1. KARNIADAKIS, G.E., BESKOK, A., ALURU, N. (2005) Microflows and nanoflows: Fundamentals and simulation. *Interdisc. Appl. Math. Series, V.29.* p. 51-77.

2. GAD-EL-HAK, M. (2006) MEMS Introduction and fundamentals. *The MEMS Hand-book, Second ed., Taylor & Francis Group, LLC.*

3. LIOU, W, FANG, Y. (2005) Microfluid Mechanics: Principles and Modeling (Nanoscience and Technology). *McGraw-Hill Education Publ.*

4. (2002) Microfluids and BioMEMS Applications, F.E.H. Tay (Ed.) . *Springer-Science.*

5. SIDIK, N.A.C., MOHHAMED, H.A., ALAWI, O.A., SAMION, S. (2014) A review on preparation methods and challenges of nanofluids. *Intern. Communic. Heat Mass Transfer. – 54.-* p.115–125.

6. CHEREVKO, V., KIZILOVA, N. (2017) Complex flows of immiscible microfluids and nanofluids with velocity slip bounary conditions. *Nanophysics, Nanomaterials, Interface Studies, and Applications, Springer Proceedings in Physics , vol. 183 - O. Fesenko, L. Yatsenko (eds.).* p. 207-230.

7. (2012) MEMS Microfluidics for Lab-on-a-Chip Applications. *Microelectromechanical Systems and Devices, N.Islam (Ed.) – InTech.*

8. CHEREVKO, V., KIZILOVA, N. (2016) Modeling of laminar flow of micro- and nanoparticles immiscible suspensions in microchannels. *Mechanics. Research and innovation. Vol. 9.* p. 47-54.

Надійшла до редколегії 26.07.18

УДК 532.595+612.13

Соловйова О. М. [1], викладач,
Кізілова Н. М. [2], д. ф.-м. н., проф.

Осциляції артеріальних судин з біоактивного матеріалу за наявності лінійного керування

[1]Харьківский національний політехнічний університет (ХПІ), Харків, Україна,
e-mail: helenfilippova@yahoo.co.uk
[2]Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна,
61022, м. Харків, пл. Свободи, 4,
e-mail: kizilova@univer.kharkov.ua

O. M. Solovjova[1], lecturer,
N. M. Kizilova[2], Dr. Sci. (Phys.-Math.), Prof.

Oscillations of arterial vessels from a bioactive material with linear control

[1]Kharkiv National Polytechnical University («KhPI»), 61002, Kharkov, Kirpichova st., 2,
e-mail: helenfilippova@yahoo.co.uk
[2]V.N. Karazin Kharkov National University,
61022, Kharkov, Svobody sq., 4,
e-mail: kizilova@univer.kharkov.ua

Для діагностичного аналізу та інтерпретації параметрів пульсових хвиль, які вимірюються в артеріях пацієнта, потрібні відповідні математичні моделі, які найчастіше базуються на рівняннях Навє-Стокса для крові як в'язкоїрідини та рівняннях пасивної в'язкопружної стінки. Такі моделі не дозволяють виявити коротко- та довгострокові зміни артеріального тиску та діаметру артерій, що пов'язані з їх активної реакцією на локальні і глобальні зміни тиску та швидкості крові. За наявності біоактивності коливання тиску, які задаються скороченнями серця, приводять до різноспрямованих зсувів фаз кривих коливань тиску p(t) та діаметру артерій d(t), нелінійних залежностей між амплітудами їх коливань, а також відповідних залежностей від частоти. В роботі наведено короткий огляд математичних моделей біоактивних матеріалі, у тому числі нуль-, одно- і двовимірних. Задача зв'язаних коливань p(t) та d(t) за наявності регуляції через концентрації вазоактивних речовин зведена до нелінійного звичайного диференціального рівняння другого порядку. Досліджений розв'язок рівняння при різних наборах параметрів моделі, які відповідають артеріальним судинам людини. Проведено порівняльний аналіз поведінки пасивної та активної стінки. Отримані умови монотонної залежності напруженні-деформації, а також залежностей S-типу і N-типу. Запропоновано нові індекси для медичної діагностики.
Ключові слова: біоактивний матеріал, артерія, кровоток, керування.

Diagnostic analysis and interpretation of the pulse wave parameters measured on the patient's arteries, appropriate mathematical models are needed. The most often required models are based on the Navier-Stokes equations for blood as a viscous liquid, and dynamic equations for passive viscoelastic wall. Such models do not allow detecting short- and long-term changes in the arterial blood pressure and local diameters associated with their active response to local and global changes in the blood pressure and flow rate. In the presence of bioactivity, the pressure fluctuations, which are specified by the heart contractions, lead to divergent phase shifts between the pressure p(t) and d(t) oscillation curves, nonlinear dependencies between the amplitudes of their oscillations, and the corresponding dependences on the frequency. A brief review of the mathematical models of bioactive materials, including zero-, one-dimensional and two-dimensional ones, is presented in this work. The problem of coupled oscillations p(t) and (t) in the presence of regulation through the concentration of vasoactive substances is reduced to a nonlinear ordinary differential equation of the second order. The solution of the equation is computed at a wide set of model parameters, which correspond to the arterial vessels. A comparative analysis of passive and active wall behavior is carried out. The conditions for monotonic strain-strain dependence and the dependencies of S-type and N-type are obtained. New indexes for medical diagnostics are proposed.
Key Words: bioactive material, artery, blood flow, control.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Жук Я. О.

1. Вступ

Біологічні матеріали мають унікальну особливість реагувати на зовнішні механічні, електричні або хімічні фактори і змінювати свої властивості та геометрію відповідно до них. Подібні властивості проявляють скелетні та гладкі м'язи (ГМ), а також матеріали, до складу яких входять м'язові клітини – серце, стінки кровоносних судин, шлунку, кишок, залоз та міхурів тощо. Режими роботи активних біологічних матеріалів та їх реологічні властивості залишаються ще недостатньо вивченими. Біоактивність стінок артеріальних судин впливає на перерозподіл крові між активними та неактивними органами і м'язами, підтримку та регуляцію артеріального тиску, і тому моделювання біоактивності допомагає у зрозумінню утворення та розвитку гіпертонії, порушень мікроциркуляції та інших захворювань [1,2].

Перша біоактивна реакція судин пов'язана з впливом артеріального тиску P (реакція Бейліса). При зростанні тиску стінки артерій як м'які в'язкопружні тканини розтягуються, що приводить до небажаного підвищення об'ємної витрати кровотоку Q, тобто постачанню кисню та живільних речовин до тканин, які цього не потребують. Підвищений рівень кисню викликає скорочення ГМ, зменшення площі перетину S або діаметра d судини, що нормалізує кровопостачання. Навпаки, при падінні тиску ГМ розслаблюються і кровоток зростає. Реакція ГК залежить від середнього окружного напруження σ в стінці, тобто $d = d(\sigma)$ - функція, що спадає. Перша реакція спрямована на підтримку режиму течії з P=const.

Друга реакція пов'язана з механочутливістю внутрішнього шару стінки – ендотелію. Під час підвищення швидкості кровотоку зростає напруження тертя на стінці τ , що приводить до прискорення продукції судинорозширювальної речовини окису азоту NO клітинами ендотелію. В результаті судина розширюється. Таким чином, друга реакція спрямована на підтримку режиму Q=const. В коронарних артеріях цей ефект контролюється концентраціями γ_j Ca^{++} та NO, в мозкових та легеневих артеріях – з O_2, CO_2, H^+, так що $d = d(\tau(\gamma_j)) = \mathrm{d}(\gamma_j)$.

2. Огляд математичних моделей

2.1. Нульвимірна модель. Рівняння цієї моделі представлені реологічним співвідношенням для стінки судини [3,4]

$$\lambda_p\left(\mathrm{p},d,\gamma\right)p' + \Phi\left(p\right) = d + \lambda_d\left(p,d,\gamma\right)d', \quad (1)$$

де $p(t)$ і $d(t)$ - осереднені вздовж судини тиск та діаметр, γ - керуючий параметр, наприклад, концентрація(ї) відповідних речовин та іонів, λ_p , λ_d - параметри моделі, функція Φ визначає залежність $d = \Phi(p)$ для пасивного матеріалу. Співвідношення (1) відповідає стандартним реологічним моделям в'язкопружних деформівних тіл [5].

Для концентрації треба задати відповідні рівняння балансу у вигляді

$$\frac{d\gamma}{dt} = -a\gamma + \psi(\mathrm{p}) + b\frac{dp}{dt}, \quad (2)$$

де a – швидкість поглинання речовини/іонів, функція $\psi(\mathrm{p})$ описує її продукцію (секрецію) у відповідь на зміну тиску в судині, а b – реакцію на осциляції тиску та відповідні напруження зсуву на стінках.

При заданих коливаннях тиску $p(t)$ модель (1)-(2) дозволяє отримувати динамічні криві $\mathrm{d}(t)$ та характеристики напруження-деформації $d(p)$. Будо показано, що на відміну від монотонних залежностей $d(p)$ для пасивної стінки, в активних стінках можуть існувати як залежності S-типу, так і N-типу, причому перші характеризуються стійкою, а другі – нестійкою динамікою [4]. Різні модифікації моделі (1)-(2) обговорювалися в [6].

2.2. Квазіодновимірна модель. Розглядається нестаціонарна осесиметрична течія в'язкої рідини по трубці $r \le R(x,t), 0 \le x \le L$ в рамках моделі [3]

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \qquad \frac{\partial p}{\partial x} = -\frac{8\pi\mu Q}{S^2}, \quad (3)$$

де $Q\left(x,t\right)$ - миттєва витрата, $S\left(x,t\right)$- площа перетину судини, $p\left(x,t\right)$- тиск, μ - динамічна в'язкість. Перше рівняння (3) є закон збереження маси, осереднений по площі перерізу, а друге – закон Пуазейля для миттєвих значень.

Для розв'язання (3) треба задати реологічне співвідношення для активної стінки, наприклад, у вигляді (1) з частковими похідними за часом замість повних. Оскільки λ_p, λ_d, Φ - нелінійні функції, рівняння типу (1) є нелінійною модифікацією в'язкопружного тіла Пойнтинга

[7]. Більш узагальнені 3-х та 5-елементні реологічні моделі біоактивних матеріалів розглядалися в [5]. Задача (1), (3) досліджувалась для різних наборів значень λ_p, λ_d, Φ шляхом розкладень за малим параметром та чисельними методами

В [8] для моделювання реакції Бейлісса в артеріях замість (1) використано рівняння балансу концентрації Ca^{++} у вигляді (2) та реологічне співвідношення у вигляді

$$\lambda_d(\gamma)\frac{\partial d}{\partial t}+d=\lambda_p(\gamma)\frac{\partial p}{\partial t}+\Phi(p)-F(\gamma), \qquad (4)$$

де F - біоактивна реакція ГМ стінки судини, залежність $F(\gamma)$ задається з експерименту. Досліджено також вплив запізнення біоактивної реакції [4,8,9].

3. Постановка та розв'язок задачі

Розглянемо біоактивну реакцію стінки судини на коливання тиску за наявності простіших форм керування $\lambda_{p,d}=\lambda_{p,d}(\gamma)$ в (1). Якщо коливання артеріального тиску в судині задані у вигляді $p(t)=\mathrm{p}_0+\tilde{p}e^{i\omega t}$, де p_0 і $\tilde{p}$ - діастолічний тиск та амплітуда, ω - частота скорочень серця, то відповідні коливання діаметру судини можна описати як $d(t)=d_0+d_pe^{i(\omega t-\varphi)}$, де φ - фазовий зсув, який утворюється за рахунок біоактивної реакції. У випадку $\lambda_{d,p}=const$ з реологічного рівняння (1) можна отримати, що

$$\tilde{d}=\frac{\sqrt{1+\omega^2\lambda_p^2}}{\omega\lambda_d}\,\tilde{p}\,,\ \varphi=a\tan\left((\omega\lambda_p)^{-1}\right), \qquad (5)$$

де λ_d і λ_p фактично відповідають часам релаксації деформацій та напружень в матеріалі стінки під час циклічного навантаження внутрішньосудинним тиском.

В моделі стінки судини як однорідної пружної тонкостінної оболонки для пасивного розтягання має місце залежність [1,2]

$$\Phi(p)=d_0+kd_0(p-p_0)\,, \qquad (6)$$

де $k=3/(4E_0h_0)$, E_0 і h_0 - модуль Юнга і товщина стінки в ненавантаженому стані.

Будемо вважати концентрації активних редовин достатньо малими, щоб було можна розкласти функції λ_p, λ_d в ряди Тейлора та знехтувати складниками другого та вищих порядків, так що $\lambda_{p,d}=\lambda_{p,d}^0+\gamma\lambda_{p,d}^1$. Визначаємо з (2) концентрацію γ як

$$\gamma=\left[a+\frac{d}{dt}\right]^{-1}\left(\psi(\mathrm{p})+b\frac{dp}{dt}\right), \qquad (7)$$

де в квадратних дужках знаходиться диференціальний оператор. Після підстановки (6), (7) в (1) отримаємо нелінійне реологічне співвідношення

$$\begin{aligned}&\lambda_p^0p''+b\lambda_p^1(p')^2+(kd_0+a\lambda_p^0+\lambda_p^1\psi(p))p'+\\&+akd_0p+ad_0(1-kp_0)=\lambda_d^0d''+\\&+(1+a\lambda_d^0+\lambda_d^1\psi(p))\,\mathrm{d}'+\mathrm{ad}+\mathrm{b}\,\lambda_d^1p'\,\mathrm{d}'.\end{aligned} \qquad (8)$$

Якщо $\varepsilon_{1,2}\ll 1$, $\varepsilon_1\equiv b\lambda_p^1/\lambda_p^0$, $\varepsilon_2\equiv \mathrm{b}\,\lambda_d^1/\lambda_p^0$, а $\psi(p)=\varsigma\,\mathrm{p}_0, \varsigma=const$, то періодичні коливання тиску будуть приводити до більш складних форм коливань діаметру судини і з (8) отримаємо замість (5)

$$\begin{aligned}\tilde{d}&=\frac{\sqrt{\omega^2A^2+(akd_0\Lambda_d+\omega^2B)^2}}{\omega(\Lambda_d^2+(\omega\lambda_d^0)^2)}\,\tilde{p},\\ \varphi&=a\tan\left(\frac{akd_0\Lambda_d+\omega^2B}{\omega A}\right),\end{aligned} \qquad (9)$$

де $A=\Lambda_p\Lambda_d-akd_0\lambda_d^0+\omega^2\lambda_p^0\lambda_d^0$,
$B=\Lambda_p\lambda_d^0-\Lambda_d\lambda_p^0$, $\qquad \Lambda_p=kd_0+a\lambda_p^0+\lambda_p^1\varsigma p_0$,
$\Lambda_d=kd_0+a\lambda_d^0+\lambda_d^1\varsigma p_0$.

Фактично (9) відповідає випадку, коли регуляція за осциляціями тиску в (2) мала у порівнянні регуляцією за тиском. У загальному випадку $\varepsilon_{1,2}$ - не малі величини і рівняння (8) треба розв'язувати для заданих коливань тиску чисельними методами. В такому разі замість (8) отримаємо диференціальне рівняння другого порядку

$$\lambda_d^0d''+q(t)\,\mathrm{d}'+\mathrm{ad}=f(t)\,, \qquad (10)$$

$$\begin{aligned}q(t)&=1+a\lambda_d^0+\lambda_d^1d_0(1-k\,\mathrm{p}_0)+\\&+(\mathrm{b}\,\lambda_d^1-\mathrm{i}\,\omega\lambda_d^1kd_0)\tilde{p}e^{i\omega t},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}f(t)&=\tilde{p}^2e^{2i\omega t}(b\lambda_p^1\omega^2-\mathrm{i}\,\omega\lambda_p^1kd_0)+(akd_0-\\&-\omega^2\lambda_p^0-\mathrm{i}\,\omega(kd_0+a\lambda_p^0+\lambda_p^1d_0(1-k\,\mathrm{p}_0))e^{i\omega t}\,\tilde{p}.\end{aligned}$$

Чисельні розрахунки по (10) проводилися методом скінчених елементів для 1d задач на інтервалі $t\in[0,T]$, де T – період серцевих скорочень. В якості функцій форми вибрано стандартні лінійні поліноми

$$N_j(t)=\begin{cases}(\mathrm{t}-\mathrm{t}_{j-1})/(\mathrm{t}_j-\mathrm{t}_{j-1}),\ \mathrm{t}\in[\mathrm{t}_{j-1},\mathrm{t}_j]\\(\mathrm{t}_{j+1}-\mathrm{t})/(\mathrm{t}_{j+1}-\mathrm{t}_j),\ \mathrm{t}\in[\mathrm{t}_j,\mathrm{t}_{j+1}]\\0,\ \ \mathrm{t}\notin[\mathrm{t}_{j-1},\mathrm{t}_{j+1}]\end{cases}$$

а розв'язок (10) шукали у вигляді $\mathrm{d(t)}=\sum_{j=1}^{n}d_jN_j(t)$, d_j - невідомі значення у вузлах сітки, n – число вузлів при умовах $\mathrm{d}(0)=d(T)=\mathrm{d}_0$. При всіх наборах значень параметрів моделі була отримана добра збіжність чисельних розрахунків з максимальним числом ітерацій k=74 при n=30 (точність обчислень 10^{-3}).

4. Результати чисельних розрахунків

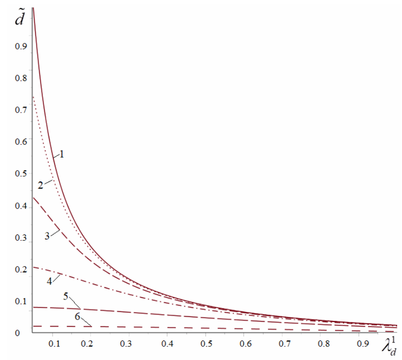
Чисельні розрахунки залежностей $\tilde{d}(\tilde{p})$ та φ з (9) проводилися при наступних наборах параметрів моделі [1,2,5-8]: $\omega=2\pi f$, $f=1-10$ Гц, $d_0=3-7$ мм, $h_0=0.3-1$ мм, $E_0=10^5-10^7$ Па, $\lambda_d^{0,1}=10^{-3}-10^{-1}$ с$^{-1}$, $\lambda_p^{0,1}=0.1-1$ м^{2}с^3/кг, $E_0=10^{-7}-10^{-5}$ Па$^{-1}$, $\varsigma=0.01-0.1$ (Па·с)$^{-1}$, $k=3/(4E_0h_0)$, $a=10^{-2}-10^{-1}$ с$^{-1}$. Результати досліджень впливу кожного з параметрів моделі наведені в Таблиці 1. Параметри а і ς оказують незначний вплив на амплітуду і фазу коливань. Управління, яке чутливе до коливань тиску $\lambda_p^{0,1}$ оказує сильний вплив на параметрі коливань стінок артерій всіх досліджених діаметрів $d_0=3-7$ мм і при деяких наборах значень (λ_p^0,λ_p^1) спостерігається зміна фази з позитивної на негативну, тобто коливання діаметру, які раніше виникали вслід за коливаннями тиску, починають випереджати останні, і максимум площини перерізу судини досягається раніше ніж досягне максимуму артеріальний тиск. Це явище добре відоме в фізіології [1,2], але його причини залишалися невідомими. Як виходить з приведених даних, в основі явища може бути біоактивна регуляція стінки судини як відгук на швидкі зміни тиску. Аналогічні чітко виражені залежності амплітуди на фази коливань спостерігаються від регуляції по $\lambda_d^{0,1}$. Для деяких значень λ_d^0 фаза стає негативною для всіх діапазонів інших параметрів моделі. Аналогічна поведінка спостерігається і для параметру λ_d^1.

Таблиця 1. Вплив параметрів моделі на безрозмірну амплітуду та фазу коливань діаметру судини (слабе зростання/зменшення - ↑/↓, або сильне - ↑↑/↓↓)

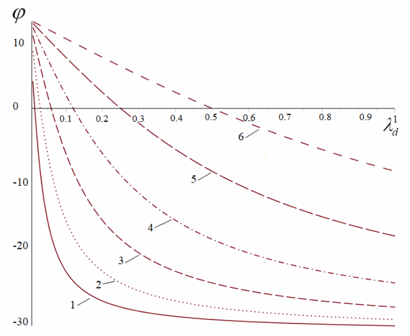
	$\tilde{d}/d_0$	φ
a	↓	↑
ς	↑	↑
λ_p^0	↑↑	↓↓
λ_p^1	↑↑	↑↑
λ_d^0	↓↓	↑↑
λ_d^1	↓↓	↓↓
E_0	↑↑	↓

В якості прикладу на рис.1а,б зображені безрозмірні залежності $\tilde{d}(\lambda_d^1)$ і $\varphi(\lambda_d^1)$ (відносно до середніх значень відповідних величин у зазначених вище інтервалах зміни) при різних значеннях параметру λ_d^1. Таким чином, збільшення часу біоактивної реакції на пов'язані зі зростанням діаметру судини внаслідок її пасивного розтягання внутрішнім тиском, веде до відносного спаду амплітуди майже на порядок, а у зсуві фаз – з 10^0 до -30^0, причому практично при всіх значеннях λ_d^0 та λ_d^1.

Аналогічна виражена залежність, але з іншим напрямком змін знаку зсуву фаз наведена на Рис.2 а,б для $\tilde{d}(\lambda_p^1)$ і $\varphi(\lambda_p^1)$ при різних наборах безрозмірних значень λ_p^0. Таким чином, біоактивність судини викликана як пасивним розтяганням стінки, так і механічного впливу кровотоку на ендотелій, викликає значні зміни амплітуди коливань та їх відставання за фазою від коливань тиску, які генерує серце під час скорочень. При різних параметрах моделі можна виявити (Рис.3) динамічну поведінку стінки монотонного, S- і N-типів, в залежності від пасивних параметрів E_0,h_0, але найбільш істотні зміни викликані біоактивною регуляцією, тобто параметрами $\lambda_d^0,\lambda_d^1,\lambda_p^0,\lambda_p^1$. На Рис.4. наведені залежності безрозмірного тиску та діаметра судини при деяких значеннях параметрів. В більшості випадків при певних наборах значень λ_d^0,λ_d^1 та λ_p^0,λ_p^1 коливання $d(t)$ починають відставати за фазою від коливань $p(t)$, що пов'язано з недостатньою біоактивністю судини.

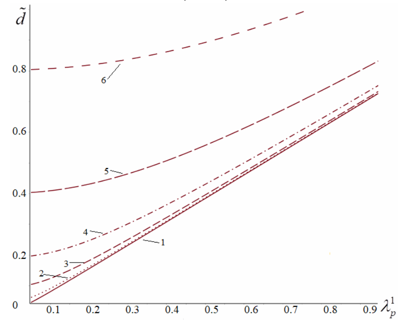


а

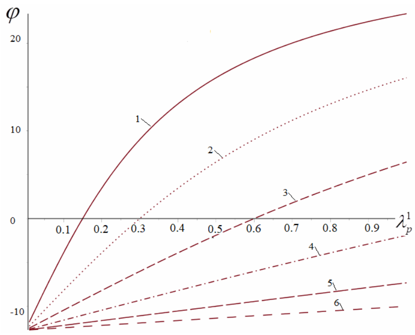


б

Рис.1. Залежності $\tilde{d}(\lambda_d^1)$ (а) і $\varphi(\lambda_d^1)$ (б); криві 1-6 відповідають значенням λ_d^0=0.001;0.005;0.01; 0.05;0.1;0.5.



а



б

Рис.2. Залежності $\tilde{d}(\lambda_p^1)$ (а) і $\varphi(\lambda_p^1)$ (б); криві 1-6 відповідають значенням λ_p^0=0.001;0.005;0.01; 0.05;0.1;0.5.

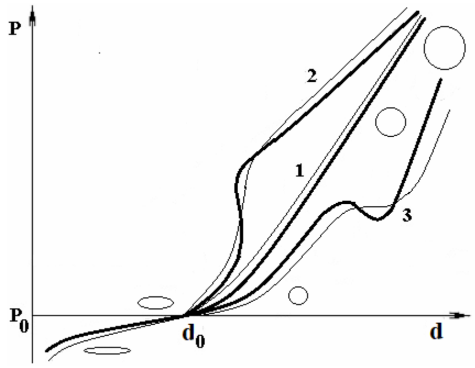


Рис.3. Криві тиск-діаметр монотонного (а), S- (б) і N- (и) типів для різних параметрів моделі та відповідні форми перерізу судини.

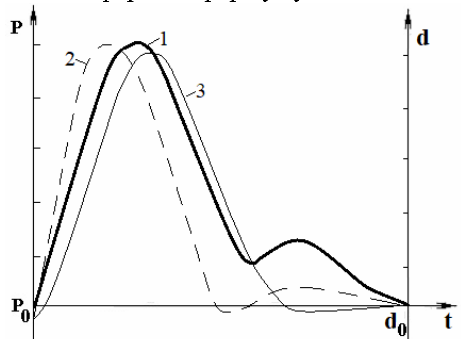


Рис.4. Безрозмірні залежності $p(t)$ та $d(t)$ при позитивному (а) та негативному (б) зсуві фази головної гармоніки.

Аналогічне явище спостерігається в здоровій аорті та крупних судинах людини [1,2], але для судин з $d_0 = 3-7$ мм це показано вперше.

5. Висновки

Запропонована в роботі модель пасивної та активної регуляції діаметра судини в залежності від величини та похідних за часом від артеріального тиску, а також концентрації вазоактивних речовин легко може бути зведена до нелінійного диференціального рівняння другого порядку, яке має аналітичні розвязки у випадку наявності малих параметрів та постійних коефіцієнтів. Для загального випадку отриманий чисельний розв'язок методом скінчених елементів.

Показано, що саме коефіцієнта активної реакції стінки судини на зміни тиску та його осциляцій за часом викликають значні зміни амплітуди коливань діаметру, а значить, і об'ємної витрати крові, а також змінюють знак фазового зсуву між $p(t)$ та $d(t)$. Таким чином, показники фазового спектру можуть бути корисними для медичної діагностики, вказуючи на наближення небезпечних змін знаку фазового зсуву на головній частоті, яка відповідає скороченням серця.

Список використаних джерел

1. *Furchgou R.F.* The obligatory role of endothelial cells in the relaxation of arterial smooth muscle by acetylcholine / *R.F. Furchgou, J.V. Zawadzki* // Nature. - 1980. - 288. - P. 373-376.
2. *Furchgott R.F.* Endothelium-derived relaxing factor: Discovery, early studies, and identification as nitric oxide // Biosci. Rep. - 1999. - 19. - P. 235-251.
3. *Регирер С.А.* / С.А. Регирер, И.М. Руткевич Модель сосудистого тонуса // Механика полимеров. - 1975. - 4. – С. 585-589.
4. *Регирер С.А.* / С.А. Регирер, Н.Х. Шадрина Элементарная модель сосуда со стенкой чувствительной к механическим стимулам // Биофизика. - 2002. - 47. - С. 908-913.
5. *Кизилова Н.Н.* / Н.Н. Кизилова, Е.Н. Соловьева Анализ дискретных реологических моделей биоактивных мягких и жидких материалов // Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна. Сер. «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». - 2017. - 35. - С. 21-30.
6. *Філіппова О.М.* / О.М. Філіппова, Н.М. Кізілова Дослідження руху в’язкої рідини у в'язкопружній камері з біоактивного матеріалу. // Вісник КНУ ім. Тараса Шевченка. Сер. Фізико-математичні науки. - 2015. - Спецвипуск. – С. 277-282.
7. *Рейнер М.* Реология. М.: Наука. - 1965. – 232 с.
8. *Бучин В.А.* /В.А. Бучин, Н.Х. Шадрина О моделировании реакции резистивного сосуда на давление // Биофизика. – 2009. – 54. - С. 267-273.
9. *Бучин В.А.* /В.А. Бучин, Н.Х. Шадрина О регуляции просвета резистивного кровеносного сосуда механическими стимулами // Известия РАН. Сер.МЖГ. – 2010. – 2. - С. 51-63.

References

1. FURCHGOU, R.F. and ZAWADSKI J.V. (1980) The obligatory role of endothelial cells in the relaxation of arterial smooth muscle by acetylcholine. *Nature.* 288. P.373-376.
2. FURCHGOU, R.F. (1999) Endothelium-derived relaxing factor: Discovery, early studies, and identification as nitric oxide. *Biosci. Rep.* 19. p. 235-251.
3. REGIRER, S.A. and RUTKEVITCH I.M. (1975). Model sosudistogo tonusa. *Mehanika polimerov*. 4. – p. 585-589WITZIG, K. (1914) *Uber erzwungene Wellenbeweg-ungen zaher, inkompressibler Flussigkeiten in elastischen Rohren.* Bern: University of Bern.
4. REGIRER, S.A. and SHADRINA, N, H. (2003). Elementarnaya model sosuda so stenkoy chuvstvitelnoy k mehanicheskim stimulam. Biophizika. 47. P. 908-913.
5. KIZILOVA, N.N. and SOLOVJOVA E.N. (2017). Analiz diskretnyh reologicheskih modeley bioaktivnyh myagkih i zhidkih materialov. *Visnyk Kharkivskogo natcionalnogo universitetu imeni V.N. Karazina. Ser. ‚Matematychne modelyuvannya. Informatciyni technologii. Avtomatyzovani systemy upravlinnya‘.* 35. p. 21-30.
6. P HILIPPOVA, O.M. and KIZILOVA, N.M. (2015). Doslidzhennya ruhu vyazkoyi ridyny u vyazkopruzhniy kameri z bioaktyvnogo materialu. *Visnyk KNU im. Tarasa Shevchenka. Ser. Phys.-Matematyhni nauky. Spetchvypusk.* p. 277-282
7. REINER, M. (1965). Reologiya . *M. Nauka.* 232 p.
8. BUCHIN, V.A. and SHADRINA, N.H. (2009). O modelirovanii reaktcii rezistivnogo sosuda na davlenie. *Biophizika.* p.267-273.
9. BUCHIN, V.A. and SHADRINA, N.H. (2010). O regulyatcii prosveta rezistivnogo krovenosnogo sosuda mehanicheskimi stimulami. Izvestiya RAN. Ser. MZhG. 2. P.51-63

Надійшла до редколегії 23.09.18 р.

УДК 539.3

Шевчук Л. В.[1], к.т.н.,
Ващіліна О. В.[1], к. ф.-м. н., доц.,
Лебедєва І.В.[2], к. ф.-м. н., доц.,
Баран С.А.[1]

Скінченно-елементний моніторинг напружено-деформованого стану дорожнього покриття з розшаруванням

[1] Національний транспортний університет, 01010, м. Київ, вул. Омеляновича-Павленка 1, e-mail: vashchilina@ukr.net
[2] Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д, e-mail: lebedevai@ukr.net

L. V. Shevchuk [1], Ph.D. (Tech.),
O. V. Vashchilina[1], Ph.D. (Phys.-Math.), As.Prof.,
I. V. Lebedyeva[2], Ph.D. (Phys.-Math.), As.Prof.
S.A. Baran[1]

Finite element monitoring of strained-deformed road surface with bundle

[1] National Transport University, 01010, Kyiv, Omeljanovicha-Pavlenka str. 1, e-mail: vashchilina@ukr.net
[2] Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkova pr., 4d, e-mail: lebedevai@ukr.net

У даній роботі вивчається проблема визначення впливу розшарування конструкції неоднорідного дорожнього покриття на розподіл у ньому полів напружень і деформацій під дією транспортних навантажень. Дослідження напружено-деформованого стану системи проводиться на основі рівнянь теорії пружності методом скінченних елементів. Виконаний комп'ютерний аналіз системи показує, що в конструкції без розшарування найнебезпечніші для дорожнього покриття напруження розтягу локалізуються у нижніх зонах другого шару, в той час як максимальні значення напружень зсуву мають місце у першому шарі в околі прикладання вертикальних сил. При розшаруванні конструкції напруження розтягу зміщуються до нижніх волокон першого шару і набувають дуже великих значень, що є найбільш небезпечним для асфальтобетонних матеріалів.
Ключові слова: поле напружень і деформацій, скінченно-елементна модель, комп'ютерний аналіз, дорожнє покриття, розшарування.

This paper studies the problem on analysis of stress-strain states of a layered road massif with delaminated zones under action of transport loads. The study of the stress-strain state of the system is carried out on the basis of equations of the theory of elasticity. The finite element model of the elastic massif equilibrium is constructed, the computer analysis of the system is performed. It is demonstrated that in the initial structure the most dangerous tensile stresses are localized in the lower zones of the second layer, while the maximal values of the shear stresses take place in the first layer in the vicinity of the external load application. The structure delamination leads to enlargement of tensile stresses which are the most dangerous for the asphalt material.
Key Words: field of stresses and deformations, finite element model, computer analysis, road covering, delamination.

Статтю представив д. ф.-м. н., проф. Жук Я.О.

1. Вступ

Розшарування асфальтобетонного покриття автомобільних доріг, викликане низькими температурами і дією транспортних навантажень, є однією з основних причин їх передчасного руйнування. У процесі експлуатації дороги наявність розшарування призводить до несучої здатності монолітних шарів, а також і до проникнення крізь неї вологи у конструкцію дорожнього одягу і ґрунтове полотно. Моделювання напружено-деформованого стану дозволить оцінити ймовірність утворення розшарування, сприяти їх прогнозуванню та зниженню рівня негативного впливу на міцність і довговічність системи.

Зазначені ефекти давно привертали увагу вчених і фахівців-дорожників, тому явище утворення тріщин стало предметом їхніх багаторічних досліджень. Так, починаючи ще з 50-60-х років минулого століття, тривають як теоретичні, так і експериментальні роботи, спрямовані на вивчення проблем розшарування асфальтобетонного покриття автомобільних доріг. Тим не менше, саме фізичне явище, при виникненні якого має місце розшарування дорожнього асфальтобетонного покриття, досі не вивчено повністю. Як зазначено в роботі [1],

утворення тріщин, є низькотемпературний вплив та деформаційні ефекти, спричинені дією статичних і динамічних транспортних навантажень. Чисто механічні погляди на процес виникнення тріщин не дали переконливого пояснення багатьом практично важливим особливостям поведінки конструкції дорожнього одягу під час експлуатації. Відповіді на деякі з цих питань подані в роботах [1, 2].

Суттєво складним є також питання аналізу утворення розшарування на асфальтобетонному покритті під дією транспортних навантажень. Ця складність зумовлена тим, що асфальтобетони проявляють властивості в'язкопружних матеріалів, тому аналіз їх деформування має здійснюватися з урахуванням досить складних реологічних процесів релаксації та повзучості, а навантаження від транспортних засобів викликають у багатошаровому масиві конструкції дороги тривимірний напружено-деформований стан з суттєвими градієнтами стискаючих, розтягуючих та зсувних напружень. Необхідно також врахувати, що асфальтобетон по-різному чинить опір цим видам напружень і особливо їх комбінації. Так, якщо його міцність при стисненні порівняно велика, то при розтягові та зсуві вона є значно меншою і до того ж суттєво залежить від температури. Не менш актуальним є вивчення питання міцності асфальтобетонних шарів під дією дотичних напружень, оскільки в реальних умовах вони досить слабко чинять опір зсуву. При цьому здатності чинити цей опір сприяють додаткові об'ємні стискаючі напруження в розглянутій зоні.

З огляду на ці обставини, можна спробувати встановити деякі найбільш загальні особливості і тенденції настання граничних напружено-деформованих станів конструкцій дорожнього одягу, як шаруватих масивів дороги, методами тривимірної теорії пружності, визначаючи зони з найбільшими розтягуючими та зсувними напруженнями і аналізуючи умови, за яких мають місце їхні найбільш несприятливі комбінації.

2. Постановка та методика розв'язування задачі

Проаналізуємо вплив розшарування конструкції одягу на характер перерозподілу в ній полів напружень. Дослідимо характер розподілу зон розтягуючих і зсувних напружень під колесами великовантажного автомобіля (рис.1) з метою аналізу впливу накладення полів напружень у залежності від міжосьових відстаней «*a*» і «b» і відстаней між колесами «*c*» і «*d*».

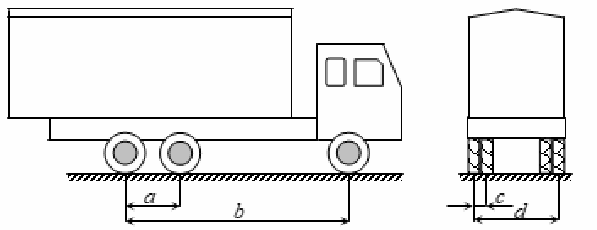


Рис.1. Геометрична схема розташування коліс тривісного автомобіля

Будемо вважати, що відповідно до загальноприйнятої методики [1] і результатів натурних спостережень ділянка контакту колеса з поверхнею дорожнього покриття є прямокутником, ширина якого визначається конструкцією колеса і не змінюється зі зміною навантаження на колесо, а висота залежить від цього навантаження.

Дослідження напружено-деформованого стану системи проводиться на основі рівнянь теорії пружності методом скінченних елементів. Об'ємними силами будемо нехтувати. У цьому випадку рівняння рівноваги елемента описується рівняннями [3, 4]

$$\frac{\partial\sigma_x}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{xy}}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{xz}}{\partial z}=0,\ \frac{\partial\tau_{yz}}{\partial x}+\frac{\partial\sigma_y}{\partial y}+\frac{\partial\tau_{yz}}{\partial z}=0,$$
$$\frac{\partial\tau_{zx}}{\partial x}+\frac{\partial\tau_{zy}}{\partial y}+\frac{\partial\sigma_z}{\partial z}=0. \quad (1)$$

Тут σ_x, σ_y, σ_z – відповідні нормальні напруження, τ_{xy}, τ_{yz}, τ_{zx} – дотичні напруження.

Вони обчислюються за допомогою рівностей
$$\sigma_i=\lambda\Delta+2G\varepsilon_i,\quad \tau_{ij}=\tau_{ji}=G\gamma_{ij}=G\gamma_{ji}, \quad (2)$$
де λ і G – сталі Ламе, які виражаються через модуль пружності E і коефіцієнт Пуассона ν формулами
$$\lambda=\frac{\mu E}{(1+\mu)(1-2\mu)},\quad G=\frac{E}{2(1+\mu)}. \quad (3)$$

У рівностях (2) використано символи

$$\Delta = \frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}, \qquad \gamma_{ij} = \frac{\partial u_j}{\partial i} + \frac{\partial u_i}{\partial j}, \quad \varepsilon_i = \frac{\partial u_j}{\partial i} \tag{4}$$

де $i, j = x, y, z$.

Після скінченно-елементної дискретизації система (1) – (4) зводиться до скінченно-елементної системи лінійних алгебраїчних рівнянь [3, 4]

$$[K_u]\{u\} = \{q\}. \tag{5}$$

Тут $[K_u]$ – матриця жорсткості для скінченно елементної моделі (рис.3) всього пружного масиву, $\{u\}$ – вектор вузлових переміщень, $\{q\}$ – вектор навантаження.

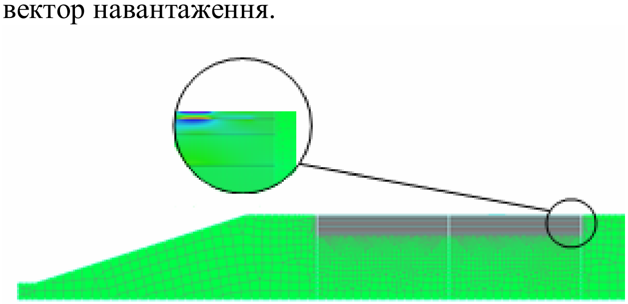


Рис.3. Скінченно-елементна модель перерізу дорожнього масиву

У результаті її розв'язання підраховуються значення переміщень, деформацій і напружень у відповідних вузлах і елементах скінченно-елементної решітки. На початку розглядається випадок, коли між першим і другим шарами має місце повне зчеплення на всій площині їх контакту. На рис.4 представлено поле напружень σ_x, орієнтація яких показана на кубику в лівому верхньому куті. Обчислення свідчать, що найбільші напруження σ_x мають місце у верхніх волокнах першого шару і вони є стискаючими (від'ємними). Зони цих напружень виділені прямокутним контуром. У ньому $\sigma_{x,\max} = -3649$ кПа. При цьому в нижніх волокнах другого шару досягаються максимальні розтягуючі напруження, які, однак, за модулем суттєво менші за стискаючі і дорівнюють $\sigma_{x,\max} = 813$ кПа.

Розшарування конструкції між першим і другим шарами приводить до значної перебудови полів напружень σ_x. Було прийнято, що зона розшарування має ширину 2,9 м і знаходиться під ділянками контакту коліс з дорогою.

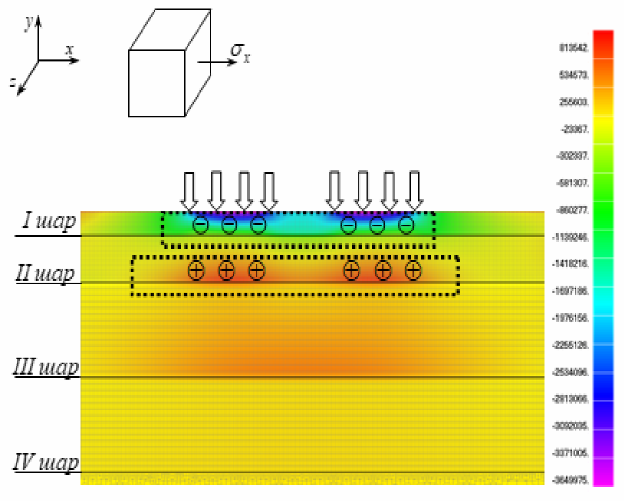


Рис.4. Поле напружень σ_x у перерізі дорожнього покриття

На рис.5 ширина ділянки розшарування відповідає ширині представленого фрагменту. У цьому випадку напруження стиску у верхніх волокнах першого шару дещо зменшилися і дорівнюють $\sigma_{x,\max} = -238$ кПа. Однак при цьому суттєво зросли напруження розтягу, які перемістилися від нижніх волокон другого шару до нижніх волокон першого шару і стали рівними $\sigma_{x,\max} = 2125$ кПа. На рис. 5 ці зони виділені відповідними прямокутниками. Відзначимо, що другий випадок є більш небезпечним, оскільки тут зросли напруження розтягу, які пов'язані з меншою міцністю асфальтобетону.

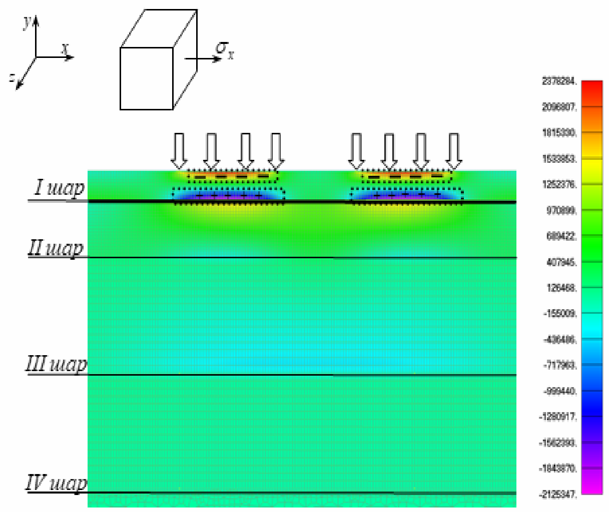


Рис.5. Поле напружень σ_x у перерізі дорожнього покриття з розшаруванням

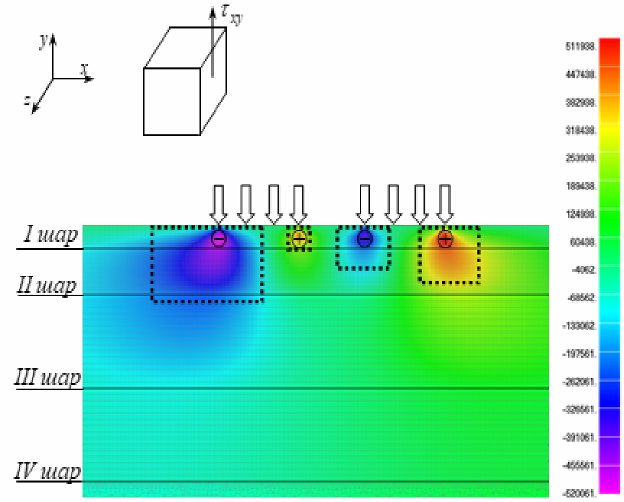


Рис.6. Розподіл дотичних напружень τ_{xy}

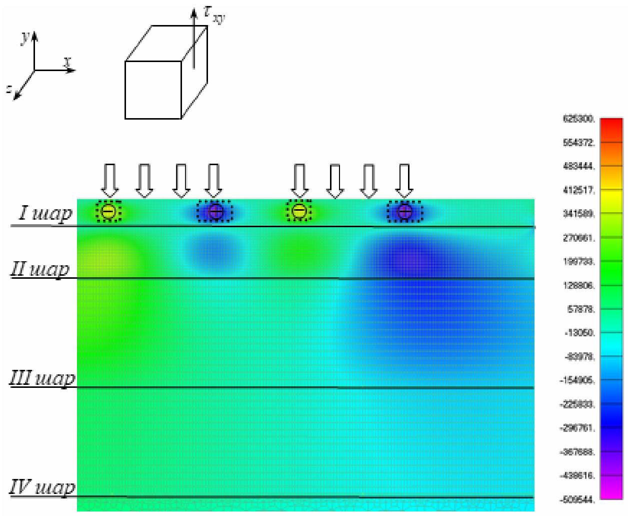


Рис.7. Розподіл дотичних напружень τ_{xy} у покритті з розшаруванням

На рис. 6 і 7 показано поля дотичних напружень τ_{xy}, які відповідають описаним випадкам. Можна бачити, що в площині контакту першого і другого шарів конструкції з розшаруванням ці напруження рівні нулю. Проте в інших зонах ці напруження зросли. Наприклад, у першому випадку $\tau_{xy,\max} = 511$ кПа (рис.6), у другому – $\tau_{xy,\max} = 625$ кПа (рис.7).

3. Висновки

Результати розрахунків свідчать, що розшарування дорожнього покриття між першим і другим шарами призводить до помітного збільшення як дотичних, так і нормальних розтягуючих напружень, що є найбільш небезпечним для асфальтобетонних матеріалів.

1. Radovsky B. Ways to reduce low-temperature cracking of asphalt pavements / B. Radovsky,V. Mozgovoj // 4-th Eurobitum Symposium. Summaries and papers. Madrid, 4-9 Oct. 1989. Vol. 1. – P. 571-575.
2. Мозговой В.В. Повышение гидроизоляционной способности асфальтобетонного покрытия / В.В. Мозговой // Проблемы механики и строительства транспортных сооружений: Труды II Международной научно-практической конференции. - Алматы. – 2015. – С. 54-60.
3. Гуляєв В.І. Дослідження термонапруженого стану конструкцій дорожнього одягу / В.І. Гуляєв, В.В. Гайдайчук, В.В. Мозговий, Ю.О. Заєць, Л.В. Шевчук // Промислове будівництво та інженерні споруди. – 2017. – №1. – С. 6-12.
4. Гайдайчук В.В. Чисельне моделювання термонапруженого стану шаруватого покриття автомобільної дороги/ В.В. Гайдайчук, В.В. Мозговий, Ю.О. Заєць, Л.В. Шевчук // Опір матеріалів і теорія споруд. – 2017. – Вип. 98 – С. 56-71.

References

1. RADOVSKY, B., MOZGOVOJ, V. (1989) Ways to reduce low-temperature cracking of asphalt pavements. *4-th Eurobitum Symposium. Summaries and papers*. Madrid, 4-9 Oct. Vol. 1. – P. 571-575.
2. MOZHOVOY V.V. (2015) Problems of mechanics and construction of transport facilities. *Proceedings of the II International Scientific and Practical Conference. Almata.* p. 54 -60.
3. GULYAEV, V.I., GAYDAYICHUK, V.V., MOZHOVYY V.V., ZAYETS, Yu.O., SHEVCHUK, L.V. (2017) Investigation of the thermo-stressed state of constructions of road clothes. *Industrial construction and engineering structures*. №1. – p. 6-12.
4. GAYDAYICHUK, V.V., MOZHOVYY V.V., ZAYETS, Yu.O., SHEVCHUK, L.V. (2017) Numerical simulation thermostressed state highway layered coating. *Resistance of materials and theory of structures*. 98. p. 56 -71.

Надійшла до редколегії 24.09.18

КОМП'ЮТЕРНІ НАУКИ ТА ІНФОРМАТИКА

УДК 517.95:336.763.2

Волощук С. Д.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Стоян В. А.[2], д.ф.-м.н., проф.

Моделювання щільності розподілу акцій з дискретними спостереженнями

[1]ДВНЗ «Київський національний економічний університет імені Вадима Гетьмана», 03680, м. Київ, пр-т. Перемоги, 54/1,
e-mail: sr.voloshchuk@gmail.com
[2]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03680, м. Київ, пр-т. Академіка Глушкова 4д,
e-mail:v_a_stoyan@ukr.net

S. D. Voloshchuk[1], PhD.,
V. A. Stoyan[2], Prof.

Modeling of shares density distribution with discrete observations

[1]Vadym Hetman Kyiv National Economics University, 03057, Kyiv, Prospect Peremogy, 54/1,
e-mail: sr.voloshchuk@gmail.com
[2]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03680, Kyiv, Glushkova st., 4d,
e-mail: v_a_stoyan@ukr.net

Відомо, що функція щільності розподілу акцій на необмежених зверху інтервалах цін та часу задовольняє однорідне диференціальне рівняння параболічного типу з відомими початковими та крайовими умовами. В роботі розглядається задача побудови функції щільності розподілу акцій на скінченному проміжку цін та скінченному інтервалі часу. При цьому початкові та крайові умови невідомі, але задача доповнюється дискретними спостереженнями за щільністю у заданих скінченних проміжках цін та часу. Кількість цих спостережень скінченна.

Щільність розподілу акцій будується у вигляді суми двох функцій в інтегральній формі. Обидва доданки цієї суми є інтегралами від добутку інтегрального ядра на невідому функцію, яка визначена за межами даного цінового та часового проміжку і моделює спостереження. Для першого доданку інтегрування проводиться в межах цінового проміжку та за межами часового проміжку. Для другого доданку інтегрування проводиться за межами цінового проміжку та в межах часового проміжку. Інтегральним ядром є фундаментальний розв'язок диференціального рівняння моделі. Невідому функцію отримаємо в аналітичному вигляді як розв'язок або псевдорозв'язок системи інтегральних рівнянь, складеної на основі спостережень за щільністю.

Також розглядається випадок, коли спостереження моделюються вектором. Тоді щільність розподілу акцій будується у вигляді суми добутків фундаментального розв'язку на компоненти невідомого вектора. В цьому випадку, на основі спостережень за щільністю, отримаємо систему алгебраїчних рівнянь, а моделюючий вектор буде її розв'язком або псевдорозв'язком.

В обох випадках функція щільності розподілу акцій буде точно задовольняти рівняння моделі, а дискретні спостереження будуть виконуватись згідно з середньоквадратичним критерієм.

Ключові слова: моделювання, дискретні спостереження, щільність розподілу акцій.

It is known, that the density distribution function of shares in the unlimited top range of prices and unlimited top interval of time satisfies the parabolic type homogeneous differential equation with the known initial and boundary conditions. In this paper we consider the problem of constructing shares density distribution function on a finite price interval and a finite time interval. In this case, the initial and boundary conditions are unknown, but the task is supplemented by discrete density observations in known finite intervals of prices and time. The number of these observations is finite.

The density distribution of shares is based on the sum of two functions in the integral form. Both components of this sum are integrals from the product of an integral kernel to an unknown function. This unknown function is defined outside of the given price and the time interval and simulates the observation. For the first component integration is made within the price interval and outside of the time interval. For the second component integration is made outside of the price interval and within the time interval. The integral kernel is the fundamental solution of the differential equation of the model. An unknown function is obtained in an analytic form as a solution or pseudosolution of the integral equations system, which is based on density observations.

Also, the case when the observation are modeled by a vector is considered. In this case the shares density distribution is constructed as a products sum of fundamental solution to the components of the unknown vector. Then, on the basis of density observations, we obtain the system of algebraic equations, and the modeling vector will be its solution or pseudosolution.

In both cases, the shares density distribution function will satisfy the equation of the model. The discrete observations will be performed in accordance with the mean-square criterion.

Key words: modeling, discrete observation, density distribution of shares.

Статтю представив д.ф.-м.н. Хусаінов Д.Я.

Вступ

Цінова політика сучасного ринку цінних паперів, зокрема акцій, будучи системою з багатьма випадковостями та невизначеностями, традиційно вивчалася та досліджувалася за допомогою імовірнісних і стохастичних методів. Побудовані з їх використанням математичні моделі [1], через неповноту інформації про їх динаміку, важко розв'язуються за допомогою відомих математичних та обчислювальних алгоритмів і методик. В силу цього, нижче, для дослідження математичної моделі ринку акцій, використовується запропонований та розвинений в [2] псевдоінверсний підхід до математичного моделювання неповно визначених розподілених динамічних систем. Продовжуючи дослідження, проведені в [3], на основі диференціального рівняння параболічного типу з дискретними спостереженнями за щільністю розподілу акцій, побудована та досліджена функція щільності розподілу акцій на скінченних проміжках цін і часу.

1. Постановка задачі

Розглянемо задачу прогнозування цінової політики на ринку акцій. Відомо, що динаміка щільності розподілу акцій задовольняє диференціальному рівнянню [1]

$$L(\partial_x,\partial_t)y(x,t)=0,\ x\in[0,\infty),\ t\in[0,\infty) \quad (1)$$

з початково-крайовими умовами

$$y(x,t)\big|_{t=0}=\varphi(x),\ x\in[0,\infty), \quad (2)$$

$$y(x,t)\big|_{x=0}=0,\ t\in[0,\infty), \quad (3)$$

де

$$L(\partial_x,\partial_t)=\partial_t-\alpha x^2\partial_x^2-\beta x\partial_x-\gamma, \quad (4)$$

α, β, γ – скалярні коефіцієнти, які визначаються [1] через норму повернення та волатильність акцій, $\varphi(x)$ – щільність розподілу акцій у початковий момент часу $t=0$.

Дослідимо динаміку функції $y(x,t)$ за таких умов: $x\in[X_1,X_2]$ – скінченний інтервал цін акцій, $t\in[T_1,T_2]$ – скінченний часовий проміжок, щільність розподілу акцій спостерігаються в заданих точках цих проміжків. Тобто розглянемо наступну задачу спостереження:

$$L(\partial_x,\partial_t)y(x,t)=0,\ x\in[X_1,X_2],\ t\in[T_1,T_2], \quad (5)$$

$$y(x_k,t_k)=Y_k, \quad (6)$$

$$x_k\in[X_1,X_2],\ t_k\in[T_1,T_2],\ k=\overline{1,K}.$$

Розв'язком задачі (5)-(6) будемо вважати функцію $y(x,t)$, яка задовольняє рівняння (5) і для якої умови спостереження (6) виконуються в середньоквадратичному сенсі, згідно критерію

$$\Phi=\sum_{k=1}^{K}(y(x_k,t_k)-Y_k)^2\to\min_{y(x,t)}. \quad (7)$$

2. Ідея розв'язання задачі

Для розв'язання задачі (5)-(7) використаємо фундаментальний розв'язок диференціального рівняння (5), методика отримання якого викладена в [2]

$$G(x-x',t-t')=\frac{1}{(2\pi i)^2}\int_{-i\infty}^{+i\infty}\int\frac{e^{p(x-x')+q(t-t')}}{L(p,q)}dpdq, \quad (8)$$

де $L(p,q)=p-\alpha x^2q^2-\beta xq-\gamma$.

Тоді, згідно з описаним у [2] методом, розв'язок задачі (5)-(7) знайдемо у вигляді суми

$$y(x,t)=y_0(x,t)+y_\Gamma(x,t),\ x\in[X_1,X_2],\ t\in[T_1,T_2]. \quad (9)$$

$$y_0(x,t)=\int_{X_1}^{X_2}dx'\int_0^{T_1}G(x-x',t-t')u(x',t')dt', \quad (10)$$

$$y_\Gamma(x,t)=\int_{X^\Gamma}dx'\int_{T_1}^{T_2}G(x-x',t-t')u(x',t')dt', \quad (11)$$

де $u(x',t')$, $(x',t')\in Z$, невідома функція, визначена в області

$$Z=([X_1,X_2]\times[0,T_1])\cup(X^\Gamma\times[T_1,T_2]),$$

$$X^\Gamma=\{x:(0<x<X_1)\cup(X_2<x<X_2+X_1)\},$$

тобто за межами заданих проміжків цін та часу.

Функцію $u(x',t')$ побудуємо такою, щоб для $y(x,t)$ виконувався критерій (7). Враховуючи (10), (11) останній представимо у вигляді

$$\Phi = \sum_{k=1}^{K} \left(\int_{X_1}^{X_2} dx' \int_{0}^{T_1} G(x_k - x', t_k - t') u(x', t') dt' + \right.$$
$$\left. + \int_{X^{\Gamma}} dx' \int_{T_1}^{T_2} G(x_k - x', t_k - t') u(x', t') dt' - Y_k \right)^2 \to \min_{u(x',t')} . \quad (12)$$

3. Інтегральна модель щільності

Для розв'язання задачі (5), (6), (12) підставимо функцію (9) з врахуванням (10), (11) в умови (6). В результаті для визначення невідомої функції $u(x',t')$, отримаємо наступну систему інтегральних рівнянь

$$\int_{X_1}^{X_2} dx' \int_{0}^{T_1} G(x_k - x', t_k - t') u(x', t') dt' +$$
$$+ \int_{X^{\Gamma}} dx' \int_{T_1}^{T_2} G(x_k - x', t_k - t') u(x', t') dt' = Y_k, k = \overline{1, K}. \quad (13)$$

Для системи (13) ведемо позначення:

$$Y = col(Y_k, k = \overline{1, K}),$$
$$A(x',t') = col(G(x_k - x', t_k - t'), k = \overline{1, K}).$$

При цьому для визначення невідомої функції $u(x',t')$ отримаємо наступну систему інтегральних рівнянь

$$\iint_Z A(x',t') u(x',t') dx'dt' = Y, \quad (14)$$

де інтегрування проводиться по об'єднаній області Z визначення підінтегральних функцій. Враховуючи зроблені позначення, критерій (12) подамо у вигляді

$$\Phi = \left\| \iint_Z A(x',t') u(x',t') dx'dt' - Y \right\|^2 \to \min_{u(x',t')} . \quad (15)$$

Розв'язками (псевдорозв'язками) системи (14), згідно критерію (15), будуть функції [2]

$$u(x',t') = A^T(x',t') P^+ (Y - G_v) + v(x',t'), \quad (16)$$

де P^+ – матриця, псевдообернена до матриці

$$P = \iint_Z A(x',t') A^T(x',t') dx'dt',$$
$$G_v = \iint_Z A(x',t') v(x',t') dx'dt',$$

$v(x',t')$, $(x',t') \in Z$ – довільна функція, інтегровна за Ріманом в області Z.

Отриманий результат свідчить про те, що при відомих спостереженнях (6) за поведінкою акцій, динаміка щільності останніх в інтервалі цін $[X_1, X_2]$ та на часовому проміжку $[T_1, T_2]$ описуватиметься знайденою згідно (9), (10), (11) функцією $y(x,t)$, яку згідно (9) отримаємо з врахуванням (16). Умови спостереження (6) при цьому будуть виконуватись згідно критерію (12). Середньоквадратична нев'язка розв'язку (9) визначається величиною

$$\varepsilon_1^2 = \min_{u(x',t')} \left\| \iint_Z A(x',t') u(x',t') dx'dt' - Y \right\|^2 =$$
$$= Y^T Y - Y^T P P^+ Y.$$

Функція $u(x',t')$, а отже і функція щільності (9) будуть єдиними розв'язками, коли [2]

$$\lim_{i,j \to \infty} (\det(A^T(x_i', t_i') A(x_j', t_j'))) > 0 .$$

4. Алгебраїчна модель щільності

Розглянемо варіант розв'язання задачі (5)-(7) за умови, коли динаміка щільності акцій моделюється не аналітично визначеною функцією $u(x',t')$, $(x',t') \in Z$, а вектором її значень

$$\bar{u} = col(u_m = u(x_m', t_m'), m = \overline{1, M})$$

в наперед заданих точках $(x_m', t_m') \in Z$, $m = \overline{1, M}$, де $M = M_0 + M_{\Gamma}$. Точки (x_m', t_m'), $m = \overline{1, M_0}$ вибираються в області $[X_1, X_2] \times [0, T_1]$, а точки (x_m', t_m'), $m = \overline{M_0 + 1, M}$ – в області $X^{\Gamma} \times [T_1, T_2]$.

У цьому випадку функції $y_0(x,t)$, $y_{\Gamma}(x,t)$ з (10), (11) будуть представлені у вигляді відповідних сум, а невідому функцію щільності $y(x,t)$ згідно (9) будемо шукати у вигляді

$$y(x,t) = \sum_{m=1}^{M} G(x - x_m', t - t_m') u_m . \quad (17)$$

Підставимо функцію (17) в систему умов (6), та критерій (7). Тоді компоненти $u_m, m = \overline{1, M}$ невідомого вектора $\bar{u}$ отримаємо як розв'язок (псевдорозв'язок) наступної системи алгебраїчних рівнянь

$$\sum_{m=1}^{M} G(x_k - x_m', t_k - t_m') u_m = Y_k, \ k = \overline{1, K} . \quad (18)$$

При цьому для $u_m, m = \overline{1, M}$ повинен виконуватись критерій

$$\Phi = \sum_{k=1}^{K} \left(\sum_{m=1}^{M} G(x_k - x_m', t_k - t_m') u_m - Y_k \right)^2 \to \min_{u_m} . \quad (19)$$

Як і у попередньому випадку, для системи (18) введемо позначення:

$$Y = col(Y_k, k = \overline{1, K}),$$

$$B = col(str(G(x_k - x'_m, t_k - t'_m), m = \overline{1,M}), k = \overline{1,K}).$$

Тоді задача (18), (19) зведеться до розв'язання системи алгебраїчних рівнянь

$$B\overline{u} = Y \qquad (20)$$

згідно критерію

$$\Phi = \left\| B\overline{u} - Y \right\|^2 \to \min_{\overline{u}} . \qquad (21)$$

Результатом розв'язання задачі (20), (21) будуть вектори [2]

$$\overline{u} = B^+ Y + (I_M - B^+ B)v , \qquad (22)$$

де B^+ – матриця, псевдообернена до матриці B, I_M – одинична матриця розмірності M, v – довільний числовий вектор розмірності M.

Знайдений таким чином числовий вектор $\overline{u}$ підставимо в співвідношення (17) і визначимо функцію $y(x,t)$, якою згідно критерію (19) при відомих дискретних спостереженнях за щільністю розподілу акцій на скінченному ціновому та скінченному часовому проміжках буде моделюватись щільність розподілу акцій. Середньоквадратична нев'язка розв'язку (17) визначається величиною [2]

$$\varepsilon_2^2 = \min_{\overline{u}} \left\| B\overline{u} - Y \right\|^2 = Y^T Y - Y^T B B^+ Y .$$

Питання існування єдиного вектора $\overline{u}$, а отже і єдиної функції щільності розподілу (17), визначатиметься умовою [2]

$$\det(B^T B) > 0 .$$

Крім того, беручи до уваги той факт, що функція (8) є фундаментальним розв'язком диференціального оператора, породженого рівнянням (5), можемо стверджувати [2], що функції (9) та (17) точно задовольняють диференціальне рівняння (5).

Висновки

На основі диференціальної моделі щільності розподілу акцій, розв'язана задача побудови функції щільності акцій з відомими дискретними спостереженнями на скінченних проміжках цін та часу. Показано, що функцію щільності акцій можна отримати в інтегральному вигляді або у вигляді суми. У першому випадку функція щільності будується як інтеграл від добутку фундаментального розв'язку диференціального рівняння на деяку невідому функцію, а в другому – як сума добутків фундаментального розв'язку на невідомий вектор. Для відшукання невідомої функції або вектора вимагається, щоб функція щільності розподілу акцій задовольняла заданим спостереженням. Тоді в першому випадку отримаємо систему інтегральних, а в другому – алгебраїчних рівнянь В обох випадках побудована функція щільності акцій узгоджується з заданими дискретними спостереженнями в середньоквадратичному сенсі. Знайдені середньоквадратичні нев'язки та умови, при виконанні яких функція щільності буде єдиною.

Список використаних джерел

1. *Ерофеенко В.Т.* Уравнения с частными производными и математические модели в экономике: курс лекций [изд. 2-е, перераб. и доп.] / В.Т. Ерофеенко, И.С. Козловская. – М.: Едиториал УРСС, 2004. – 248 с.
2. *Стоян В. А.* Математичне моделювання лінійних, квазілінійних і нелінійних динамічних систем / В.А. Стоян. – Київ.: ВПЦ «Київський університет», 2011. – 320 с.
3. *Волощук С.Д.* Математичне моделювання щільності акцій в скінченому проміжку цін / С.Д. Волощук, О.М. Юркевич // Моделювання та інформаційні системи в економіці. – № 91. – 2015. – С. 132-141.

References

1. EROFEENKO, V.T. and KOZLOVSKAJA, I.S. (2004) *Uravnenija s chastnymi proizvodnymi i matematicheskie modeli v jekonomike: kurs lekcij* [Partial differential equations and mathematical models in economics: a course of lectures], 2nd ed, Editorial URSS, Moscow, Russia, 248 p.
2. STOYAN, V.A. (2011) *Matematychne modeliuvannia linijnykh, kvazilinijnykh i nelinijnykh dynamichnykh system: monohrafiia* [Mathematical modeling of linear, quasilinear and nonlinear dynamical systems: monograph], VPTS “Kyivs'kyj universytet”, Kyiv, Ukraine, 320 p.
3. Voloshchuk, S.D. and Yurkevich, O.M. (2015) “Mathematical modeling the density of stock in a finite price range”, *Modeliuvannia ta informatsiini systemy v ekonomitsi*, vol. 91, pp. 132-141.

Надійшла до редколегії 20.11.2018

УДК 517.9

Іванов С. М.[1], асп.,
Яценко В. О.[2], д.т.н., проф.

Виявлення змінювання векторного поля за часовим рядом

[1,2]Інститут космічних досліджень НАНУ та ДКАУ, 03680, м. Київ, проспект Академіка Глушкова, 40, корп. 4/1,
e-mail: [1]formula87@icloud.com
e-mail: [2]vyatsenko@gmail.com

S. M. Ivanov[1], PhD stud.,
V. O. Yatsenko[2], Dr. Sci., Prof.

Detecting variation of the vector field from a time series

[1,2]Space Research Institute of NASU-SSAU, 03680, Kyiv, Academika Glushkova str., 40, build. 4/1,
e-mail: [1]formula87@icloud.com
e-mail: [2]vyatsenko@gmail.com

Запропоновано декомпозицію експонент Ляпунова, в результаті якої, одна з декомпозиційних границь може бути використана для виявлення змінювання векторного поля за часовим рядом. Приведено доведення лем з впорядкування декомпозиційних границь і лінійності. Представлено алгоритм обчислення декомпозиційних границь за часовим рядом.

Ключові слова: експоненти Ляпунова, векторне поле, декомпозиція, многовид.

The unpredictable behavior of nonlinear dynamical systems has become a very interesting subject in the research of the fluid and geomagnetic systems. The exponential divergence or convergence of nearby trajectories is the most main indicator of detecting variation of the vector field in general. However, it requires an analysis of all Lyapunov exponents. We have applied Lyapunov exponents decomposition to consider one indicator of the vector field variation. The algorithm of computation of this indicator is presented. An autonomous dynamical system of ordinary differential equations is considered. The lemmas of ordered indicators and linearity are proved. To calculate the dimension of the phase space, the Grassberger-Procaccia algorithm is proposed. Takens's theorem about embedding is used. It is supposed that a manifold is locally homeomorphic to a certain domain of Euclidean space. Therefore, we used the Euclidean norm, despite the fact that the Riemannian metric arises. These results are useful for the reconstruction of dynamical systems from a time series. These results are useful for the reconstruction of dynamical systems from a time series.

Key Words: Lyapunov exponents, vector field, decomposition, manifold.

Статтю представив д.т.н. Гаращенко Ф.Г.

Вступ

При дослідженні різних нелінійних динамічних систем, зокрема рідинних [1], геомагнітних [2], однією з актуальних задач є проведення аналізу їх властивостей за наявним експериментальним часовим рядом. Цьому питанню присвячується багато робіт, які спрямовані на обчислення спектра експонент Ляпунова [1-4]. Однак ми часто не знаємо чи дійсно постійне векторне поле досліджуваної системи, що є важливим при реконструкції динамічних систем, які описуються звичайними диференціальними рівняннями (ЗДР). Також це питання виникає при дослідженні реконструйованої системи на відповідність реальним експериментальним даним [5-7]. Найменші зміни векторного поля, що задає диференціальні рівняння, можуть вплинути на зміну властивостей цієї системи [8-9]. При поширенні таких результатів на реальний процес можливі небажані негативні явища, особливо в задачах прогнозування, управління і т.д. Тому виявлення постійності або змінності векторного поля досліджуваної системи за часовим рядом є актуальною задачею і потребує подальшого розгляду.

Постановка задачі

Нехай M - компактний гладкий многовид розмірності m. Динамічною системою на цьому многовиді M є дифеоморфізм $\varphi: M \to M$ для дискретного часу $t \in N$, або векторне поле f на M з неперервним часом $t \in \Re$ [10]. Многовид M локально гомеоморфний деякій області евклідового простору $\Re^d$, виходячи з означення метричного простору [11].

Для пари (f, y), де f векторне поле гладкості C^2 і $y = M \to \Re$ - гладка функція на M, існує відображення $F_{(f,y)}: M \to \Re^{2m+1}$ (Theorem 2, F. Takens) [10]. Розглянемо деяку автономну динамічну систему ЗДР, яка є реконструкцією, а $t \in \Re$:

$$\dot{x} = f(x), \tag{1}$$

де f - визначена в області $G \subset \Re^d$, $d \geq 2$, f і $\frac{df}{dt}$ - неперервні в G, а x є вектором. А також припустимо, що система має нульовий розв’язок $x(t) \equiv 0$. Накладені обмеження гарантують існування і єдиність розв'язку $x(t)$, як задачі Коші, при будь-яких початкових умовах. Нехай f є поліноміальна вектор-функція гладкості C^2.

Систему (1) можна розкласти в ряд Маклорена в деякому околі початку координат та записати:

$$\dot{x} = Jx + V(x), \tag{2}$$

де $J = df/dx|_{x=x_0}$ - матриця Якобі для f, а складові $V(x)$ - описують члени від другого і більш високого порядку малості. Еволюція дотичного вектора r в просторі дотичних на $x(t)$

$$\dot{r} = Jr. \tag{3}$$

Середній експоненціальний темп дивергенції (конвергенції) дотичного вектора r визначається експонентами Ляпунова, визначеними за наступною формулою:

$$\lambda(x_0, r(0)) = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|r(t)\|}{\|r(0)\|}, \tag{4}$$

де $\|r(t)\|$ і $\|r(0)\|$ позначають норму Рімановоі метрики. Однак, виходячи з вищесказаного, ми можемо використати Евклідову норму. Тому розглянемо наступні траєкторії в d - вимірному фазовому просторі, почавши з двох сусідніх початкових умов x_0 та $\widetilde{x}_0 = x_0 + \delta x_0$, які еволюціонують у часі за наступними векторами $x(t)$ та $\widetilde{x}(t) = x(t) + \delta x(t)$ з Евклідовою нормою $\|r(t)\| = \|\delta x(x_0, t)\| = (\delta x_1^2 + \delta x_2^2 + \ldots + \delta x_d^2)^{1/2}$.

Відмітимо, що є d - вимірний базис $\{e_i\}$ для $r(0)$, тоді $\lambda_i(x_0) = \lambda(x_0, e_i)$, $i = \overline{1,d}$.

Для виявлення локальної постійності або змінності векторного поля досліджуваної системи можна використовувати локальні експоненти Ляпунова, обчислені за часовим рядом, за методом, який представлений в [1], однак тоді необхідно аналізувати кожний з λ_i, $i = \overline{1,d}$.

Але, якщо розглянути дискретний розподіл $p_i^t = \frac{\|r_i(t)\|}{\sum_{i=1}^{d} \|r_i(t)\|}$, $i = \overline{1,d}$, і представити $\|r_i(t)\| = p_i^t \sum_{i=1}^{d} \|r_i(t)\|$, тоді пропонується зробити декомпозицію експонент Ляпунова [12], де з’явиться комплексний показник для локального дослідження векторного поля.

Ставиться задача опису такого критерію виявлення локальної постійності або змінності векторного поля, як одного з декомпозиційних границь, а також впорядкування цих границь.

Декомпозиція експонент Ляпунова

Лема 1. Сума границь: $l_D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}$ і $l_i = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \ln \frac{p_i^t}{p_i^0}$, $i = \overline{1,d}$, тобто $\lambda_i = l_D + l_i$, $i = \overline{1,d}$, є спектром експонент Ляпунова.

Доведення.

За означенням, характеристичні експоненти Ляпунова [7], представляються формулою (4) і представляють собою границі.

Отже, за означенням границі $\forall \delta > 0$, $\exists N = N(\delta)$, $\forall t > N: \left| \frac{1}{t} \ln\left(\frac{\|r(t)\|}{\|r(0)\|} \right) - \lambda \right| < \delta$.

Тому

$$\forall \frac{\delta}{2} > 0,\ \exists N_1 = N_1\left(\frac{\delta}{2}\right),$$

$$\forall t > N_1: \left| \frac{1}{t} \ln \frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)} - l_D \right| < \frac{\delta}{2};$$

$$\forall \frac{\delta}{2} > 0,\ \exists N_2 = N_2\left(\frac{\delta}{2}\right),$$

$\forall t > N_2: \left| \frac{1}{t} \ln \frac{p_i^t}{p_i^0} - l_i \right| < \frac{\delta}{2}$, $i = \overline{1,d}$. Таким чином,

$$\left|\left(\frac{1}{t}\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}+\frac{1}{t}\ln\frac{p_i^t}{p_i^0}\right)-\left(l_D+l_i\right)\right|=$$

$$=\left(\left|\frac{1}{t}\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}-l_D\right|+\right.$$

$$\left.+\left|\frac{1}{t}\ln\frac{p_i^t}{p_i^0}-l_i\right|\right)<\left(\frac{\delta}{2}+\frac{\delta}{2}\right)=\delta .$$

За $N(\delta)$ оберемо $\max\{N_1;N_2\}$, і отримаємо: $\lambda_i=l_D+l_i$, $i=\overline{1,d}$.

Зауваження 1. При використанні Евклідової норми, $\operatorname{Re}\lambda_i=l_D+l_i$, $i=\overline{1,d}$.

Величина l_D є комплексним показником для локального дослідження зміни векторного поля.

2. Величина l_D є найбільшою серед декомпозиційних границь й існує наступне впорядкування: $l_D\ge l_1\ge l_2\ge\ldots\ge l_d$.

Доведення.

Оскільки $\lim\limits_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}\ge\lim\limits_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\frac{r_i(t)}{r_i(0)}$ (так як логарифмічна функція монотонно зростає), $i=\overline{1,d}$, то $l_D\ge\lambda_i$, $i=\overline{1,d}$, $\lambda_i-l_D\le 0$, $\Rightarrow\lambda_i-l_D=l_i\le 0$. Так як $\lambda_1\ge\lambda_2\ge\ldots\ge\lambda_d$, існує впорядкування $l_D\ge l_1\ge l_2\ge\ldots\ge l_d$.

Лема 3. Якщо $l_D=\lim\limits_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}=$ $=\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}$, $\forall t>N_1$, то система є лінійною з постійними параметрами.

Доведення.

За означенням лінійної системи з постійними параметрами: матриця Якобі $Jac^t\to const$. При наступній декомпозиції Грама-Шмідта: $Jac^t=Q^tR^t$, де R^t - верхньо-трикутна матриця $\Rightarrow R^t(i,i)\to const$, а тому $\sum_i R^t(i,i)=\sum_i r_i(t)\to const$, $i=\overline{1,d}$.

Тому: $\lim\limits_{t\to\infty}\frac{1}{t}\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}=\ln\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}$. Таким чином, для лінійної системи з постійними параметрами, вираз $\frac{\sum_{i=1}^{d} r_i(t)}{\sum_{i=1}^{d} r_i(0)}$ є постійним для кожного моменту t.

Обчислення декомпозиційних границь за часовим рядом

Алгоритм оцінювання матриці Якобі за часовим рядом був представлений в багатьох роботах, зокрема в [1]. В [4] був представлений також алгоритм реортонормалізації Грама-Шмідта, за яким розкладається матриця на ортогональну Q і верхньо-трикутну R: $Jac=QR$.

Тоді найбільша декомпозиційна границя може бути обчислена за формулою (5):

$$l_D=\frac{1}{N\tau}\sum_{k=1}^{N}\ln\sum_{i=1}^{d} R^k(i,i), \tag{5}$$

де τ - кількість точок, обраних для оцінювання матриці Якобі за 1 ітерацію, а N - відповідно кількість цих ітерацій.

Однак при дослідженні часового ряду, невідома розмірність фазового простору досліджуваної системи d. Але за допомогою алгоритму Грасбергера-Прокаччі отримаємо оцінку розмірності d, попередньо визначивши часову затримку t_d (наприклад, використавши автокореляційну функцію). Тоді відповідно до теореми 1 Такенса [10] можна реконструювати за часовим рядом однієї змінної деякої системи: $y_i=[x(i\tau),\ldots,x(i\tau+(d-1)t_d)]$ і обчислити (5).

Висновки

У статті розглянуто показник виявлення постійності або змінності векторного поля досліджуваної динамічної системи за часовим рядом. Представлена декомпозиція експонент Ляпунова, а також впорядкування декомпозиційних границь.

Список використаних джерел

1. *Sano M.* Measurement of Lyapunov spectrum from a chaotic time series / Sano M. and Sawada Y. // Phys. Rev. Lett. – 1985. – №55, P. 1082-1085.
2. *Іванов С.М.* Прогнозування геомагнітного Кр індексу за допомогою дискретної білінійної моделі / С.М. Іванов, В.О. Яценко // Вісник Київського національного університету ім. Тараса Шевченка. – Серія: Фізико-математичні науки. – 2016. – № 3. – С. 65-68.
3. *Wolf A.* Determining lyapunov exponents from time series / Wolf A., Swift J. B., Swinney H. L., Vastano J. A. // Phisica 16D. – Amsterdam, Netherlands. – 1985. – P. 285-317.
4. *Eckmann J.-P.* Liapunov exponents from time series / Eckmann J.-P., Oliffson Kamphorst S., Ruelle D., Ciliberto S. // Phys. Rev. A. – 1986. – V. 34. - № 6, P. 4971-4979.
5. *Arnold V.I.* Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations / V.I. Arnold. – NY: Springer, 2011. – pp. 351.
6. *Арнольд В.И.* Дополнительные главы теории обыкновенных дифференциальных уравнений / В.И. Арнольд. – Москва: Наука, 1978. – 304 с.
7. *Анищенко В.С.* Лекции по нелинейной динамике / В.С. Анищенко, Т.Е. Вадивасова. – Москва: Инст. Комп. Исслед., 2011. – 516 с.
8. *Андронов А.А.* Грубые системы / А.А. Андронов, Л.С. Понтрягин // Докл. АН СССР. – 1937.– № 5. – С. 247-250.
9. *Никульчев Е.В.* Геометрический метод реконструкции систем по экспериментальным данным / Е.В. Никульчев // Письма в жур. техн. физики. – 2007. – Т.33. – № 6. – С. 83-89.
10. *Takens F.* Detecting strange attractors in turbulence / F. Takens // Dynamical Systems and Turbulence. Lecture Notes in Mathematics. – 1981. – № 989. pp. 366–381.
11. *Андреев Г.Н.* Тензорное исчисление: учебное пособие / Г.И. Андреев. – М.: МГИУ, 2008. – 184 с.
12. *Іванов С.М.* Декомпозиція експонент Ляпунова хаотичних динамічних систем / С.М. Іванов // Dynam. syst. model. and stab. investig.: inter. conf., 24-26 May 2017, Kyiv, Ukraine: abstracts. – Kyiv. – 2017. – P. 87.

References

1. SANO, M. & SAWADA, Y. (1985) Measurement of Lyapunov spectrum from a chaotic time series. *Phys. Rev. Lett*. 55(10), p. 1082-1085.
2. IVANOV, S. & YATSENKO, V. (2016) Prohnozuvannia heomahnitnoho Kp indeksu za dopomohoiu dyskretnoi biliniinoi modeli. *Visnyk Kyivskoho natsionalnoho universytetu im. Tarasa Shevchenka. Seriia: Fizyko-matematychni nauky*. № 3, p. 65-68.
3. WOLF, A. & SWIFT, J. B. & SWINNEY, H. L. & VASTANO, J. A. (1985) Determining lyapunov exponents from time series. *Phisica 16D.* p. 285-317.
4. ECKMANN, J.-P., OLIFFSON KAMPHORST, S., RUELLE, D., CILIBERTO, S. (1986) Liapunov exponents from time series. *Phys. Rev. A.* 34(6), p. 4971-4979.
5. ARNOLD, V.I. (2011) *Geometrical methods in the theory of ordinary differential equations*. New York: Springer.
6. ARNOLD, V.I. (1978) *Dopolnitel'nyye glavy teorii obyknovennykh differentsial'nykh uravneniy*. Moskva: Nauka.
7. ANISHCHENKO, V.S. and VADIVASOVA, T.Ye. (2011) *Lektsii po nelineynoy dinamike*. Moskva: Instit.Komp. issled.
8. ANDRONOV, A.A. & PONTRYAGIN, L.S. (1937) Grubyye sistemy. *Dokl. AN SSSR*. 5. p. 247-250.
9. NIKULCHEV, Ye.V. (2007) Geometricheskiy metod rekonstruktsii sistem po eksperimental'nym dannym. *Pis'ma v zhur. tekhn. fiziki*. 33(6). p. 83 -89.
10. TAKENS, F. (1981) Detecting strange attractors in turbulence. *Dynamical Systems and Turbulence. Lecture Notes in Mathematics.* 989. p.366–381.
11. ANDREEV, G.N. (2008) *Tenzornoe ischislenie: uchebnoe posobie*. Moskva: MGIU.
12. IVANOV, S.M. (2017) Dekompozytsiya eksponent Lyapunova khaotychnykh dynamichnykh system. In *Dynam. syst. model. and stab. investig.: inter. conf.,* Wednesday 24th to Friday 26th May 2017. Kyiv: DP Inform-analit. agenstvo. pp. 87.

Надійшла до редколегії: 06.03.2018

УДК 004.2

Коваль Ю.В., асистент,
Крак Ю.В., д.ф.-м.н., проф.

Організація пам'яті для віртуальних процесів

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4д,
e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

Iu. V. Koval, Assistant,
Iu. V. Krak, Prof.

Organization of memory for virtual processes

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkov ave., 4d,

e-mail: kafedraTK@unicyb.kiev.ua

В статті розглянуто два способи організації розрізнення одиниць пам'яті: адресацію та іменування. Визначено та досліджено властивості просторів одиниць пам'яті з адресацією та іменуванням. Визначено операції над одиничними елементами таких просторів. Обрано спосіб розрізнення змінних для віртуального процесу.
Ключові слова: віртуальний процес,змінна.

In this paper two ways of organizing the distinction of memory units: addressing and naming, are considered. The properties of spaces of memory units with addressing and naming are determined and investigated. The operations on single elements of such a space are determined. For units of address space there are: reading, writing, creating, destroying, determining unit size, receiving an address, and determining the size of the address. For namespace names, there are: read, write, create, delete, delete values, checking existence, checking the existence of a value, obtaining a size, and obtaining a name. For the space of memory units with addressing, the coefficient of intensity of memory usage is determined and a tendency to change of its value is indicated. The method for calculating this coefficient for multiprocessor systems and multichannel memory systems is indicated. For namespace names, the nonlinearity of such a space, the absence of a neighborhood relation, and the ability to save the program execution in that space are indicated. A way to distinguish variables for a virtual process is chosen.
Key Words: virtual process, variable.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов А.В.

1. Вступ та постановка задачі

В роботі [1] визначено операції, що застосовуються до процесів, що складають віртуальний процес [2]. Ці операції можно поділити на дві головні групи: керування процесами та обміну значеннями міх процесами. При застосуванні операцій керування процес сприймається як єдине ціле. При застосуванні операцій з обміну значеннями сукупність значень, що обробляються під час виконання програми є або внутрішньою частиною процесу, або впливає на стан внутрішніх частин процесу, що призводить до того, що потрібно сприймати процес як структуровану річ. Традиційна сучасна схема такої структури виділяє в процесі частину з кодом, частину зі значеннями, що зберігаються константами чи змінними, та вільними одиницями пам'яті. Традиційно змінні та константи мов програмування реалізуються одиницями пам'яті адресованого простору процесу де зберігаються значення, що призводить до достатньо поширеного ототожнення значень, констант, змінних, та одиниць пам'яті в яких вони зберігаються чи реалізуються. В подальшому тексті таке ототожнення може вживатися, якщо це не заважатиме змістовному викладенню матеріалу. Частина зі значеннями в свою чергу розподіляється на глобальні, статичні, динамічні, та автоматичні значення. Динамічні та автоматичні змінні чи константи реалізуються відповідно купою та стеком. Розвиток апаратних засобів обчислювальних пристроїв призвів до реалізації стеку командами процесора, що суттєво спростило вживання автоматичних змінних та параметрів функцій. Для динамічних змінних досі використовуються програмні реалізації. Вказана структура з одного боку обумовлена, а з іншого сприяла ізоляції окремого процесу в середовищі його виконання. Втім така ізоляція ускладнює реалізацію віртуальних процесів. З вище сказаного випливає така постановка задачі: запропонувати, дослідити, та порівняти способи реалізації різних моделей організації пам’яті для віртуальних процесів.

2. Властивості простору з адресацією

Лінійне адресування одиниць пам’яті традиційно використовується в комп’ютерах і фактично є визначальною рисою комп’ютерної архітектури всіх поколінь обчислювальної техніки. Обмін значеннями між процесором та пам’ятю відбувається або по одній одиниці пам’яті, або фіксованою кількістю таких одиниць. Для сучасних архіектур здебільшого реалізується другий варіант або декілька других варіантів. Перевагами такої організації пам’яті є простота реалізації, велика швидкодія при виконанні операцій зчитування та запису, однакова швидкодія для всіх одиниць пам’яті. Недоліками є, так зване, вузьке гирло, що полягає в блокуванні однією операцією зчитування чи запису доступу до всіх одиниць пам’яті, обмеженість розміру адреси, та статичність структури складаних змінних. Змінні зі змінюваною структурою реалізуються програмним способом зі зменшенням швидкодії використання. За умови одного процесора перший недолік не був критичним. Компромісним рішенням вирішення проблеми вузького гирла є кеш-пам’ять між процесором та пам’ятью.

Нехай M - кількість операцій, що може виконати пристрій памяті за одиницю часу, P – кількість операцій з одиницями пам’яті, що виконує один процесор за одиницю часу. Коефіцієнт інтенсивності використання пам’яті *MUIC* визначається наступною формулою *MUIC=M/P*. При значеннях *MUIC* більше або рівному одиниці пам’ять встигає виконати запити процесора без затримки. Інакше процесор має втрати на очікування пам’яті. Для багатопроцесорної системи формула набуває вигляд *MUIC= /(n*P)* – де *n* – кількість процесорів. Для систем з багатоканальною архітектурою пам’яті формула набуває вигляду *MUIC=(k*M)/(n*P)* – де *k* – кількість каналів пам’яті.

Теорема: Найбільша ефективність використання багатоканальної пам’яті досягається при рівночастковому збереженні значення змінної в усіх частиних пам’яті.

Доведення теореми відбувається порівнянням всіх можливих варіантів.

Наслідок: Розмір мінімального значення для обміну між процесорм та пам’ятю є *k*, розмір змінної повинен бути кратним *k*.

Обмін значеннями між кеш-пам’яттю та пам’яттю можливо організувати блочним методом. Час виконання операції над блоком дорівнює часу операції над одиницею пам’яті в попередніх випадках. При використанні блочного методу взаємодії з пам’ятью формула набуває вигляду *MUIC=(bs*k*M)/(n*P)* – де *bs* – розмір блоку. За рахунок використання блоків можливо збільшити значення *MUIC*, що доцільно при зростанні кількості процесорів в обчислювальному пристрої. Для кеш-пам’яті, що є пам’ятью виключно одного процесора чи ядра, залишається обмін фіксованою кількістю одиниць пам’яті. Нажаль, в програмах змінні мають інший розмір, ніж розмір блоку взаємодії з пам’ятью. Тому остання формула дає лише найкращу оцінку *MUIC*. В найгіршому випадку справедливою буде попередня формула. Програміст може штучно покращити результати оцінки *MUIC* використовуючи багатократні обчислення з обмеженою кількостю значень. Втім велика кількість алгоритмів з обробки великих об’ємів значень не можуть застосовувати це штучне покращення.

Операції, що можуть бути виконані над змінними, є операції зчитування, запису, створення, знишення, визначення адреси, визначення розміру змінної та її адреси. Реалізація цих операцій здійснюється через операціїї над одиницями пам’яті. Так операції зчитування чи запису реалізуються набором відповідних операцій над одиницями пам’яті, що необхідні для збереження одного значення. Створення змінної реалізується виділенням вільних необхідних одиниці пам’яті та позначення їх як зайнятих. Знищення змінної можливе тільки для створених змінних та реалізується вивільненням одиниць пам’яті. Визначення розміру змінної реалізується як визначення кількості одиниць пам’яті, що потрібні для збереження значення змінної та додаткової інформації. Для змінних з постійним розміром реалізується як константна операція з використанням адресної арифметики. Для змінних зі змінним розміром реалізується як додаткова частина змінної, що зберігає її розмір. Визначення рзміру адреси змінної є константна операція для фіксованої архітектури та визначається розміром адреси адресованого простору.

Для змінних, подібно до *MUIC*, коефіцієнт інтенсивності використання змінних *VUIC* обчислюється за формулою *VUIC=MUIC/v* – де *v* – розмір змінної в одиницях пам’яті.

Теорема: Співвідношення значень *MUIC* і *VUIC* та розміру адресованого простору при зростанні розміру останнього прямує до нуля.

Доведення теореми спирається на властивості процесорів і пам’яті та їх розвиток і зміни.

3. Властивості простору з іменуванням

Побудова складного імені методом комбінації імен в програмуванні використовувалося з часів перших мов програмування високого рівня. Такий підхід дозволяє не тільки іменувати кожен елемент окремо, але і створювати ієрархії елементів за критерієм однакового початку (або кінця) імен. [3,4] (Другий спосіб використовується в системі доменних імен мережі Інтернет.) Складне ім'я створюється з простих (атомарних) імен за допомогою службових символів та додаткових значень. Як правило, це символ крапка, але так само використовуються нахилені риски, двокрапки, знак оклику, різноманітні дужки, комбінації цих символів. Складне ім'я може бути отримано внаслідок обчислення деякого виразу. Це означає фактичне існування операторів складаного імені та розглядання імені як окремого типу значень.

Операціями з елементами пам'яті простору з іменуванням є власне операції над змінними, а сама пам'ять фактично є сукупність цих змінних. Додатковими властивостями та операціями для такої реалізації змінних є: відсутність змінної є інформативною, визначена операція перевірки існування змінної, змінна може не містити значення, визначені операції перевірки існування значення та знищення значення змінної, значення змінної може складати саме її ім'я, визначена операція отримати ім'я змінної, створення нової змінної визначається генерацією нового імені, знищення змінної може мати результатом останнє значення змінної, змінні можуть мати різний розмір, що є потенційно не обмеженим.

В просторі з іменуванням елементів на відміну від простору з адресацією неможливо вказати сусідні елементи. Відстань, що може бути обчислена для імен не корелює з кількістю елементів між ними, для яких вона обчислена.

Теорема: Простір з іменуванням є нелінійним.

Доведення теореми базується на наведених властивостях такого простору.

Наслідок: Простір з іменуванням дозволяє зберігати значення з рекурсивною генерацією.

Складне ім'я може зберігати не тільки інформацію про структуру системи значень, але і інформацію про стан виконання процесу, що відповідає часовій характеристиці процесу. В адресованому просторі інформацію про такий стан зберігає стекова структура, що відповідає поточному стану вкладених викликів. На відміну від цього, складне ім'я може зберігати не тільки поточний стан, але і всю історію процесу. Об'ємність такої інформації ускладнює практичне застосування такого підходу, проте не робить його неможливим.

Наявність чи відсутність обмеження на одночасну роботу тільки з одною змінною визначається не типом ідентифікації одиниць пам'яті, а кількістю процесорних елементів та технічними реалізаціями взаємодії процесорів та пам'яті. Синтаксично вказування одночасної дії для змінних можливо як для адресованого простору, так і для іменованого. Для першого випадку l-значення описується математичним виразом з результатом в множині множин натуральних чисел, що є адресами. В другому випадку – лексичним виразом з результатом в множині слів, що є іменами. Технічна реалізація обох варіантів може бути здійснена в різні способи, один із яких полягає в наявності достатньої кількості процесорних елементів та загальномовного середовища передачі значень.

Теорема: Для вказаної реалізації кількість одночасно виконаної операції над змінними з можливо різним результатом обмежується кількістю процесорних елементів.

Доведення теореми спирається на аналіз алгоритму роботи такої пам'яті.

4. Простір збереження значень віртуального процесу

Віртуальний процес, у відповідності до означення яке наведено в [2], при кількості складових процесів більше одного не може розміститися в одному адресному просторі. Множина значень, що обробляються віртуальним процесом, та програмний код віртуального процесу розміщені у віртуальному просторі такого процесу. Розглянувши властивості просторів з адресацією та іменуванням способом реалізації розрізняння елементів такого простору буде використано іменування одиниць простору. Розмір таких одиниць не є однаковим, що дозволяє віртуальному процесу існувати в сукупному середовищі комп'ютерів з можливо різними розмірами одиниць пам'яті. Крім того, змінні віртуального процесу не обов'язково мають розмір одиниць пам'яті будь якого комп'ютера. Як вже зазначено, цей розмір не обмежується жодним чином, а тому є потенційно нескінченим.

Розподіл змінних на глобальні, локальні, зовнішні та внутрішні змусив ввести правило переваги внутрішнього імені над зовнішнім. Такий підхід був чудовим рішенням з огляду на захист внутрішніх змінних. Проте блокування зовнішніх змінних виявилося неприємною платнею за досягнутий результат. Доки вирішувати цю проблему вдавалося за рахунок різноіменування різних змінних, цією проблемою можно було нехтувати. Втім очевидно, що зі зростанням розміру програм та появою бажання змістовного іменування змінних проблема стала загострюватися. Рішення було запропоноване у вигляді можливості використання повних та коротких імен. Насправді, короткі імена автоматично доповнювалися компіляторами до повних, проте програміст міг працювати у звичній ідеології локальний/глобальний. Оберненою стороною цього рішення стала можливість доступу до локальних імен ззовні локального фрагменту коду. Були запропоновані два альтернативних рішення: перше було запропоновано в об'єктно орієнтованому підході та вимагало вказування додаткового атрибута видимості/доступності (за аналогією FAT-подібних файлових систем), друге полягало в регламентуванні синтаксису імен (еквівалент додаткового атрибуьа)(за аналогією до UNIX-подібних файлових систем). Обидва підходи вирішують поставлену задачу і вибір на користь одного з них більше визначається знаннями та уподобаннями автора мови програмування ніж змістовними доводами за чи проти. Компромісним підходом стало вживання атрибуту видимості/доступності як частини імені з використанням символів подібних до плюса та мінуса при описі елементів програми. При використанні елементу ці додаткові символи не є обов'язковими. Ці символи вступають в коллізію з операторами математичних дій, втім застосування оператора взяття значення вирішує цю проблему.

5. Висновки та подальші напрямки роботи

В результаті проведених досліджень було обрано спосіб організації пам'яті для віртуального процесу. Вказується на можливість прискорення отримання результату за рахунок використання пам'яті з можливістю виконання багатьох операцій над одиницями пам'яті одночасно. Подальші дослідження будуть спрямовані на те, щоб якісно та кількісно оцінити вказане прискорення.

Список використаних джерел

1. *IU.V. Koval* Virtual Process Controlling [Online] Available from https://csit.am/2017/Proceedings/PDC/PDC6.pdf [Accessed: 14th May 2018]
2. *Крак Ю.В.*, Коваль Ю.В., Ставровський А.Б. Віртуальний процес: означення та застосування в створенні системи жестового інтерфейсу / Ю.В. Крак, Ю.В. Коваль, А.Б. Ставровський // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка Серія фізико-математичні науки. – 2015. – №1. - С.141-144.
3. WIKIPEDIA, THE FREE ENCYCLOPEDIA *File Table* [Online] Available from https://en.wikipedia.org/wiki/File_Allocation_Table [Accessed: 14th May 2018]
4. *K. Thompson, D. M. Ritchie, UNIX PROGRAMMER'S MANUAL, Bell Labs, USA, p. 194, November 1971, https://www.bell-labs.com/usr/dmr/www/1stEdman.html*

References

1. *IU.V. Koval* Virtual Process Controlling [Online] Available from https://csit.am/2017/Proceedings/PDC/PDC6.pdf [Accessed: 14th May 2018]
2. KRAK IU.V., KOVAL IU.V., STAVROVSKYI A.B. (2015) *Virtual process: definition and application for gestures interface system creation.* Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv Series Physics & Mathematics. Vol. 1. p.141-144.
3. .WIKIPEDIA, THE FREE ENCYCLOPEDIA *File Allocation Table* [Online] Available from https://en.wikipedia.org/wiki/File_Allocation_Table [Accessed: 14th May 2018]
4. *K. Thompson, D. M. Ritchie, UNIX PROGRAMMER'S MANUAL, Bell Labs, USA, p. 194, November 1971, https://www.bell-labs.com/usr/dmr/www/1stEdman.html*

Надійшла до редколегії 15.05.2018

УДК 519.21

І.В. Розора, *к.ф.-м.н., доц.*

Про точність та надійність моделювання в просторі $L_p([0,T])$ вхідного гауссового процесу, що подається на лінійну систему, з урахуванням виходу

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

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

On simulation accuracy and reliability in the space $L_p([0,T])$ for the input Gaussian process served by the linear system taking into account the output

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

В роботі вивчається моделювання вхідного сигналу, що подається на лінійну систему із заданою імпульсною перехідною функцією. Відгук системи є вихідним процесом. За допомогою розкладу Карунена-Лоева будується модель, яка наближає вхідний процес з урахуванням виходу із наперед заданими точністю та надійністю у банаховому просторі $L_p([0,T])$.

Ключові слова: Моделювання, гауссовий процес, розклад Карунена-Лоева, точність та надійність.

Nowadays the theory of stochastic processes is widely used in different branches of science and not only in natural science. That's why one of the relevant problems is to build a mathematical model of stochastic process and study its properties. The problems of numerical simulations become especially important due to the powerful possibilities of computer technologies that allow to create software modeling tools and predict the behavior of a random process. In the article, we study the simulation of the input signal, which is applied to a linear system with known impulse response function. System response is an output process. With the help of the Karhunen-Loeve expansion, a model is constructed which approximates the input process taking into account the output with predefined accuracy and reliability in the Banach space $L_p([0,T])$. *In this paper the issue on accuracy and reliability of the constructed model is considered, it means that at first we construct the model and then verify it using some adequacy tests with known accuracy and reliability.*

Key Words: simulation,Gaussian process, Karhunen-Loeve expansion, accuracy and reliability.
Communicated by Prof. Kozachenko Yu.V.

1 Вступ

Однією з важливих проблем теорії випадкових процесів є побудова математичної моделі випадкового процесу та вивчення її властивостей. Проблеми чисельного моделювання стають особливо актуальними завдяки потужним можливостям комп'ютерних технологій, що дозволяють використовувати програмне забезпечення як інструмент моделювання та прогнозувати поведінку випадкового процесу. Існують різні методи моделювання випадкових процесів і полів. У [3, 8, 6, 5, 4] ця проблема була досліджена для різних стохастичних процесів і полів, зокрема для гауссівських та субгауссівських випадкових процесів.

Стаття присвячена моделюванню вхідного сигналу на лінійну однорідну систему з урахуванням виходу. Вхідний процес є гауссовим з неперервною кореляційною функцією. Лінійна система описується дійсною інтегрованою з квадратом імпульсною перехідною функцією. Відгук системи розглядається як вихідний процес. За допомогою розкладу Карунена-Лоева будується модель, яка наближає вхідний процес з урахуванням виходу із наперед заданими точністю та надійністю у банаховому просторі $L_p([0,T])$. Для цього використовуються методи та властивості квадратично-гауссових випадкових процесів.

2 Основні означення

Розглянемо ймовірнісний простір (Ω, F, P).

Нехай $T = [0,T]$, $X = \{X(t), t \in T\}$ — неперервний у середньому квадратичному квадратично-інтегрований випадковий процес, що задано на визначеному ймовірністому просторі, $\mathsf{E}X(t) = 0, B(t,s) = \mathsf{E}X(t)X(s), t, s \in T$ — коваріаційна функція цього випадкового процесу. Зрозуміло, що $B(t,s)$ — невід'ємно визначена функція. Оскільки процес $X(t)$ неперервний у середньому квадратичному, то функція $B(t,s)$ неперервна на $T \times T$.

Розглянемо інтегральне рівняння

$$z(t) = \lambda \int_T B(t,s)z(s)\,ds. \qquad (1)$$

В книзі [10] показано, що інтегральне рівняння (1) має не більш ніж зліченну сім'ю невід'ємних характеристичних значень. Нехай λ_n — характеристичні числа, а $z_n(t)$ — відповідні їм функції рівняння (1). Занумеруємо λ_n у порядку зростання

$$0 < \lambda_1 \leqslant \ldots \leqslant \lambda_n \leqslant \lambda_{n+1} \leqslant \ldots.$$

Будемо вважати, що $z_n(t)$ — ортонормована послідовність

$$\int_T z_n(t)z_m(t)\,dt = \delta_m^n,$$

де δ_m^n — символ Кронекера. Функції $z_n(t)$ також є неперервними при $t \in T$.

Тоді, використовуючи розклад Карунена-Лоева, випадковий процес можна подати у вигляді

$$X(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z_n(t)}{\sqrt{\lambda_n}}\xi_n. \qquad (2)$$

При цьому ряд (2) збігається в середньому квадратичному, ξ_n — некорельовані випадкові величини: $\mathsf{E}\xi_n = 0$, $\mathsf{E}\xi_n\xi_m = \delta_m^n$.

В цій статті розглядаємо випадок, коли випадковий процес $X(t)$ є гауссовим. Тоді у розкладі (2) випадкові величини ξ_n — незалежні гауссові такі, що $\mathsf{E}\xi_n^2 = 1$.

Розглянемо однорідну лінійну систему з дійсною інтегрованою з квадратом імпульсною перехідною функцією $H(\tau)$, що визначена на області $\tau \in [0,T]$. Тобто відгук системи на вхідний сигнал $X(t)$, що спостерігається на $[0,T]$, має наступний вигляд

$$Y(t) = \int_0^T H(\tau)X(t-\tau)d\tau, \quad t \in [T, 2T] \qquad (3)$$

та $H \in L_2([0,T])$.

Зауваження 1. *Інтеграл в (3) розуміється в сенсі Рімана.*

Вважаємо, що імпульсна перехідна функція відома. Введемо таке позначення

$$c_k(t) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_n}} \int_0^T H(\tau)z_k(t-\tau)d\tau, \ t \in [0,T] \qquad (4)$$

Якщо ряд $\sum\limits_{k=0}^{\infty} \frac{z_k(t)}{\sqrt{\lambda_k}}\xi_k$ збігається рівномірно на $[0,T]$ з ймовірністю 1, то з (2) та (3) випливає, що відгук системи $Y(t)$ зображається як

$$Y(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k \cdot c_k(t), \qquad (5)$$

де функції $c_k(t)$ з (4).

Надалі припускаємо, що ряд в (5) збігається рівномірно з ймовірністю 1. (Умова **D**.)

Зауваження 2. *Легко показати, що ряд в* (2) *збігається рівномірно з ймовірністю 1, коли збігається ряд* $\sum\limits_{k=0}^{\infty} v_k E|\xi_k|$, *де* $v_k = \max_{[0,T]} |z_k(t)|$. *Але така умова є досить обмежуюча. Умови рівномірної зміжності таких рядів можна знайти в книзі [1].*

В цій статті вивчається побудова моделі випадкового процесу $X(t)$ і знаходяться умови при яких, модель наближає вхідний процес $X(t)$, враховуючи відгук системи (вихідний процес) $Y(t)$ у банаховому просторі $L_p([0,T])$, $p \geqslant 1$.

У якості моделі випадкового процесу $X(t)$ будемо розуміти зрізаний ряд з (2).

Означення 2.1. Випадковий процес $X_N = \{X_N(t),\, t \in T\}$, $N \in \mathbb{N}$, де

$$X_N(t) = \sum_{n=1}^{N} \frac{z_n(t)}{\sqrt{\lambda_n}}\xi_n,$$

називається моделлю Карунена–Лоева процесу $X = \{X(t), t \in T\}$.

Якщо модель $X_N(t)$ розглянути як вхідний сигнал системи, то відповідний вихідний процес можна подати як

$$Y_N(t) = \sum_{k=0}^{N} \xi_k \cdot c_k(t),$$

де функції $c_k(t)$ задані в (4).

Позначимо через $\xi_N(t)$ суму квадратів різниць $X(t) - X_N(t)$ та $Y(t) - Y_N(t)$

$$\xi_N(t) = (X(t) - X_N(t))^2 + (Y(t) - Y_N(t))^2. \qquad (6)$$

Означення 2.2. Будемо говорити, що модель $X_N(t)$ наближує випадковий процес $X(t)$ з урахуванням відгуку системи (2) із заданою надійністю $1-\nu$, $\nu \in (0,1)$, та точністю $\delta > 0$ в просторі $L_p([0,T])$, якщо

$$P\left\{\int\limits_0^T |\xi_N(t)|^p dt > \delta\right\} < \nu.$$

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 [4].

Означення 3.1. [4] Нехай $\Xi = \{\xi_t,\, t \in T\}$ — сім'я сумісно гауссівських випадкових величин, $E\xi_t = 0$ (наприклад, ξ_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

$$\eta = \bar{\xi}^T A \bar{\xi} - \mathsf{E}\bar{\xi}^T A \bar{\xi}, \tag{7}$$

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

або $\eta \in SG_\Xi(\Omega)$ представляється як середньоквадратична границя послідовності випадкових величин з (7)

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

Означення 3.2. [4] Випадковий процес $\xi(t) = \{\xi(t),\, t \in T\}$ називається квадратично-гауссовим, якщо для кожного $t \in T$ випадкова величина $\xi(t)$ належить простору $SG_\Xi(\Omega)$.

В [1] показано, що

- $SG_\Xi(\Omega)$ є банаховим простором з нормою $\|\zeta\| = \sqrt{\mathsf{E}\zeta^2}$;
- $SG_\Xi(\Omega)$ є підпростором простору Орліча, що породжується функцією
$$U(x) = \exp|x| - 1;$$
- норма $\|\zeta\|_{L_U(\Omega)}$ на $SG_\Xi(\Omega)$ еквівалентна нормі $\sqrt{\mathsf{E}\zeta^2}$.

Приклад 1. Розглянемо сім'ю гауссівських центрованих випадкових процесів

$\xi_1(t), \xi_2(t), \ldots, \xi_n(t)$, $t \in T$. Нехай матриця $A(t)$ є симетричною. Тоді

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

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

Загальні властивості квадратично-гауссових випадкових процесів можна знайти в книзі [1].

Будемо використовувати наступний результат про розподіл хвоста для норми квадратично-гауссового процесу в просторі $L_p([0,T])$. Доведення міститься статті [7].

Теорема 3.1. *[7] Нехай $\{T, A, \mu\}$ — вимірний простір, де $\boldsymbol{T}$ — параметрична множина. Випадковий процес $\xi = \{\xi(t),\, t \in \boldsymbol{T}\}$ є квадратично-гауссовим. Припустимо, що існує інтеграл Лебега $\int_{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{E}\xi^2(t))^{\frac{p}{2}} d\mu(t) < \infty$ при $p \geqslant 1$. Тоді інтеграл $\int_{\boldsymbol{T}} \xi^p(t)d\mu(t)$ існує з ймовірністю 1 та*

$$P\left\{\int_{\boldsymbol{T}} |\xi(t)|^p d\mu(t) > x\right\} \leqslant$$

$$\leqslant 2\sqrt{1 + \frac{x^{1/p}\sqrt{2}}{C_p^{\frac{1}{p}}}} \exp\left\{-\frac{x^{1/p}}{\sqrt{2}C_p^{\frac{1}{p}}}\right\}, \tag{8}$$

для всіх $x \geqslant (\frac{p}{\sqrt{2}} + \sqrt{(\frac{p}{2}+1)p})^p C_p$, де $C_p = \int_{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{E}\xi^2(t))^{\frac{p}{2}} d\mu(t)$.

4 Моделювання випадкового процесу із наперед заданою точністю та надійністю в $L_p([0,T])$ з урахуванням відгуку системи

Легко бачити, що процес $Z_N(t) = \xi_N(t) - E\xi_N(t)$ є квадратично-гауссовим процесом, де $\xi_N(t)$ визначено в (6). Тому можна для даного процесу використати результати Теореми 3.1.

Позначимо

$$\phi_{kl}(t) = \frac{z_k(t)z_l(t)}{\lambda_k\lambda_l} + c_k(t)c_l(t). \tag{9}$$

Тоді із співвідношень (2), (5) та (6) випливає, що випадковий процес $\xi_N(t)$ зображається у вигляді ряду

$$\xi_N(t) = \sum_{k=N+1}^{\infty} \sum_{l=N+1}^{\infty} \phi_{kl}(t)\xi_k\xi_l. \qquad (10)$$

Також визначимо приріст функцій з (9)

$$\Delta\phi_{kl}(t,s) = \phi_{kl}(t) - \phi_{kl}(s). \qquad (11)$$

Має місце наступна лема.

Лема 1. *Нехай* $\xi_N(t)$ *випадковий процес з* (6). *Тоді*

$$\begin{aligned} E\xi_N(t) &= \sum_{k=N+1}^{\infty} \phi_{kk}(t); \\ D\xi_N(t) &= \sum_{k,l=N+1}^{\infty} 2(\phi_{kl}(t))^2. \qquad (12) \end{aligned}$$

Доведення. Оскільки ξ_k, $k \geqslant 0$, – незалежні гауссові центровані випадкові величини з дисперсією 1, то з (10) випливає, що

$$\begin{aligned} E\xi_N(t) &= \sum_{k=N+1}^{\infty} \sum_{l=N+1}^{\infty} \phi_{kl}(t) E\xi_k\xi_l \\ &= \sum_{k=N+1}^{\infty} \phi_{kk}(t) \end{aligned}$$

Обчислимо спочатку другий момент для $\xi_N(t)$

$$E(\xi_N(t))^2 = E\left(\sum_{k=N+1}^{\infty} \sum_{l=N+1}^{\infty} \phi_{kl}(t)\xi_k\xi_l\right)^2.$$

Використаємо формулу Іссерліса (див., наприклад, [1]) для гауссових центрованих випадкових величин $EX_1X_2X_3X_4 = EX_1X_2EX_3X_4 + EX_1X_3EX_2X_4 + EX_1X_4EX_2X_3$. Тоді

$$E(\xi_N(t))^2 = E \sum_{k,l=N+1}^{\infty} \left(\phi_{kk}(t)\phi_{ll}(t) + 2(\phi_{kl}(t))^2\right).$$

А отже, дисперсія випадкового процесу $\xi_N(t)$ дорівнює

$$\begin{aligned} D\xi_N(t) &= E(\xi_N(t))^2 - (E\xi_N(t))^2 \\ &= \sum_{k,l=N+1}^{\infty} \left(2(\phi_{kl}(t))^2\right). \end{aligned}$$

$\square$

Розглянемо такі умови:

- **Умова A:** Імпульсна перехідна функція інтегрована з квадратом

$$I_H = \int_0^T H^2(\tau)d\tau < \infty.$$

- **Умова C:** Збігаються ряди

$$\sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{v_k^i q_k^{2-i}}{\lambda_k} < \infty, \ i = 0, 1, 2,$$

де значення q_k визначені в умові B, а

$$v_k = \max_{t \in T} |z_k(t)|. \qquad (13)$$

$$\delta_0(N,T) = \sqrt{2}(1 + T \cdot I_H)\left(\sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{v_k^2}{\lambda_k}\right) \qquad (14)$$

В наступній лемі знаходяться оцінки середнього, дисперсії процесу $\xi_N(t)$.

Лема 2. *Припустимо, що виконуються умови* ***A, C, D***. *Тоді*

$$E\xi_N(t) \leqslant (1 + I_H T) \sum_{k=N+1}^{\infty} \frac{v_k^2}{\lambda_k} := m_N^* \qquad (15)$$

$$D\xi_N(t) \leqslant (\delta_0(N,T))^2.$$

Доведення. Використовуючи результат леми 1 та співвідношення (9), маємо

$$E\xi_N(t) = \sum_{k=N+1}^{\infty} \phi_{kk}(t) = \sum_{k=N+1}^{\infty} \left(\frac{z_k^2(t)}{\lambda_k} + c_k^2(t)\right) \leqslant$$

$$\leqslant \sum_{k=N+1}^{\infty} \left(\frac{v_k^2}{\lambda_k} + c_k^2(t)\right).$$

Оцінимо зараз $c_k^2(t)$.

$$\begin{aligned} c_k^2(t) &= \frac{1}{\lambda_k}\left(\int_0^T H(\tau) z_k(t-\tau)d\tau\right)^2 \\ &\leqslant \frac{1}{\lambda_k}\int_0^T H^2(\tau)d\tau \left(\int_0^T z_k^2(t-\tau)d\tau\right) \\ &\leqslant \frac{I_H T v_k^2}{\lambda_k}. \qquad (16) \end{aligned}$$

Отже, оцінку (15) для $E\xi_N(t)$ повністю доведено.

З леми 1 випливає, що для оцінки дисперсії випадкового процесу $\xi_N(t)$ потрібно оцінити значення $(\phi_{kl}(t))^2$:

$$\begin{aligned}(\phi_{kl}(t))^2 &= \frac{1}{\lambda_k\lambda_l}z_k^2(t)z_l^2(t)\\ &+ 2\frac{1}{\sqrt{\lambda_k\lambda_l}}z_k(t)z_l(t)c_k(t)c_l(t)\\ &+ c_k^2(t)c_l^2(t).\end{aligned}$$

Тоді, використовуючи останню рівність та нерівності (13), (16), дисперсія процесу $\xi_N(t)$ оцінюється наступним чином:

$$D\xi_N(t) = 2\left(\left(\sum_{k=N+1}^{\infty}\frac{z_k^2(t)}{\lambda_k}\right)^2 + \right.$$

$$\left. +2\left(\sum_{k=N+1}^{\infty}\frac{z_k(t)c_k(t)}{\sqrt{\lambda_k}}\right)^2 + \left(\sum_{k=N+1}^{\infty}c_k^2(t)\right)^2\right)$$

$$\leqslant 2(1+T\cdot I_H)^2\left(\sum_{k=N+1}^{\infty}\frac{v_k^2}{\lambda_k}\right)^2.$$

□

Результати леми 2 можна використати для наближення гауссового випадкового процесу за допомогою моделі Карунена-Лоева з урахуванням відгуку системи із наперед заданою точністю та надійністю в просторі неперервних функцій.

Позначимо

$$m_N(t) = E\xi_N(t),\ Z_N(y) = \xi_N(t) - E\xi_N(t).$$

Тоді, оскільки $\xi_N(t)$ є сумою квадратів гауссових процесів, то $m_N(t) \geqslant 0$. З іншої сторони, використовуючи оцінку (15), маємо $m_N(t) \leqslant m_N^*$, $t \in [0,T]$.

Теорема 4.1. *Припустимо, що виконуються умови **A, C, D**. Модель Карунена-Лоева $X_N(t)$ наближає вхідний гауссовий процес $X(t)$ з урахуванням виходу системи (2) із заданою надійністю $1-\nu$, $\nu \in (0,1)$, та точністю $\delta > 0$ в просторі $L_p([0,T])$, якщо N задовольняє наступні нерівності*

$$\delta \geqslant \left((\frac{p}{\sqrt{2}} + \sqrt{(\frac{p}{2}+1)p})T^{\frac{1}{p}}\delta_0(N,T) + T^{\frac{1}{p}}m_N^*\right)^p$$

$$2\quad\sqrt{1+\frac{(\delta^{\frac{1}{p}} - T^{\frac{1}{p}}m_N^*)\sqrt{2}}{T^{\frac{1}{p}}\delta_0(N,T)}}$$

$$\times\quad \exp\left\{-\frac{\delta^{\frac{1}{p}} - T^{\frac{1}{p}}m_N^*}{\sqrt{2}T^{\frac{1}{p}}\delta_0(N,T)}\right\} < \nu \qquad (17)$$

де значення $\delta_0(N,T)$ визначено в (14).

Доведення. З означення 2.2 випливає, що потрібно знайти оцінку для ймовірності

$$P\{\int_0^T |\xi_N(t)|^p dt > \delta\}.$$

Випадковий процес $\xi_N(t)$ можна подати у вигляді

$$\xi_N(t) = \xi_N(t) - E\xi_N(t) + E\xi_N(t) = Z_N(t) + m_N(t).$$

Тоді, використовуючи нерівність Мінковського, маємо

$$\left(\int_0^T |\xi_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}} = \left(\int_0^T |Z_N(t)+m_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\leqslant \left(\int_0^T |Z_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}} + \left(\int_0^T |m_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}}$$

$$\leqslant m_N^*\cdot T^{\frac{1}{p}} + \left(\int_0^T |Z_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}}.$$

Оскільки $0 \leqslant m_N(t) \leqslant m_N^*$, то для $\delta > m_N^* T^{\frac{1}{p}}$ отримаємо

$$\{\int_0^T |\xi_N(t)|^p dt \geqslant \delta\} = \{\left(\int_0^T |\xi_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}} \geqslant \delta^{\frac{1}{p}}\} \subset$$

$$\subset \{\left(\int_0^T |Z_N(t)|^p dt\right)^{\frac{1}{p}} \geqslant \delta^{\frac{1}{p}} - m_N^* T^{\frac{1}{p}}\}$$

та

$$P\{\int_0^T |\xi_N(t)|^p dt \geqslant \delta\} \leqslant$$

$$P\{\int_0^T |Z_N(t)|^p dt \geqslant \left(\delta^{\frac{1}{p}} - m_N^* T^{\frac{1}{p}}\right)^p\}. \qquad (18)$$

Оскільки

$$\sup_{\tau\in[0,T]} EZ_N^2(t) = \sup_{\tau\in[0,T]} Var\xi_N(t) \leqslant \delta_0^2(N,T),$$

то

$$C_p = \int_0^T (\mathbf{E}Z_N^2(t))^{\frac{p}{2}} dt \leqslant T\delta_0^p(N,T).$$

Твердження теореми буде повністю доведено, якщо використати результат теореми 3.1 для квадратично-гауссового процесу $Z_N(t)$ та підставити отриману в лемі 2 оцінку для $\delta_0(N,T)$.

□

Список використаних джерел

1. *Булдыгин В.* Метрические характеристики случайных величин и процессов, / В.Булдыгин, Ю.Козаченко.– Киев, ТВиМС.– 1998.
2. *Гихман И.* Теория вероятностей и математическая статистика / И.Гихман, А.Скороход, М.Ядренко.– Киев, Вища школа.– 1988.
3. *Козаченко Ю.* Моделювання випадкових процесів та полів/ Ю.Козаченко, А.Пашко, І.Розора.– Київ, Задруга.– 2007.
4. *Козаченко Ю.* Моделювання випадкових процесів із заданою точністю та надійністю / Ю.Козаченко, О.Погоріляк, І.Розора, А.Тегза.— Лондон, ISTE Press - Elsevier.– 2016.
5. *Козаченко Ю.* Моделювання гауссових випадкових процесів / Ю.Козаченко, І.Розора // Random Oper. and Stochastic Equ. – 2003.– 11, №.3. – С.275–296.
6. *Козаченко Ю.* Точність та надійність моделей випадкових процесів в просторі $Sub_\varphi(\Omega)$ / Ю.Козаченко, І.Розора // Теорія ймовірностей та математична статистика. – 2005.– **71**. С.105–117.
7. *Козаченко Ю.* Критерій перевірки гіпотези про коваріаційну функцію стаціонарного Гауссового випадкового процесу / Ю.Козаченко, В.Трошкі // Modern Stochastics: Theory and Applications.– 2014.– **1**.– С.139–149.
8. *Розора І.* Моделювання точності строго φ-субгауссових випадкових процесів в просторі $L_2[0,T]$ / І.Розора // Обчислювальна та прикладна математика.– 2009.– **2**, №.98.– С.68–76.
9. *Розора І.* Про моделювання вхідних випадкових процесів на лінійну систему із заданою точністю та надійністю / І.Розора, М.Лижечко // Monte Carlo Methods Appl.– 2018.– **24**, №. 2.– С.129–137.
10. *Трикоми Ф.* Интегральные уравнения / Ф.Трикоми.– Москва, Ин.Лит.– 1960.

References

1. BULDYGIN, V., KOZACHENKO, YU. (2000) *Metric characterization of random variables and random processes*, Amer. Math. Soc., Providence, RI.
2. GIKHMAN, I.,SKOROKHOD, A., YADRENKO, M., (1988) *Probability Theory and Mathematical Statistics*, Kyiv:"Vyscha Shkola". (in Russian)
3. KOZACHENKO YU., PASHKO A., ROZORA I. (2007) *Simulation of Stochastic Processes and fields*, Zadruga, Kyi. (in Ukrainian)
4. KOZACHENKO Yu., POGORILYAK O., ROZORA I. AND TEGZA A. (2016) *Simulation of Stochastic Processes with Given Accuracy and Reliability*, ISTE Press - Elsevier.
5. KOZACHENKO, YU., ROZORA, I. (2003) Simulation of Gaussian stochastic processes, *Random Oper. and Stochastic Equ.*, **11**, №.3, 275–296.
6. KOZACHENKO, YU., ROZORA, I. (2005) Accuracy and Reliability of models of stochastic processes of the space $Sub_\varphi(\Omega)$, *Theory of Probability and Mathematical Statistics*, **71**, 105–117.
7. KOZACHENKO YU., TROSHKI V. (2014) A criterion for testing hypotheses about the covariance function of a stationary Gaussian stochastic process, *Modern Stochastics: Theory and Applications*, **1**, 139–149.
8. ROZORA I. (2009) Simulation accuracy of strictly φ-Sub-Gaussian stochastic processes in the space $L_2[0,T]$, *Obchuslyuvalna ta prykladna matematyka*, **2**, №.98, 68–76.(in Ukrainian)
9. ROZORA I., LYZHECHKO M. (2018) On the modeling of linear system input stochastic processes with given accuracy and reliability, *Monte Carlo Methods Appl.*, **24**, №. 2, 129–137.
10. TRIKOMI F. (1960) *Integral equations*, In.Lit., Moscow, 1960.(in Russian)

Надійшла до редколегії: 20.12.2018

РАДІОФІЗИКА

УДК 537.52:533.9.08

Мурманцев О. О.[1],студ.,
Веклич А. М.[1], д.ф.-м.н., проф.,
Борецький В. Ф.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Клешич М. М.[1], пров.інж.
Фесенко С. О.[1], асис.
Левада Г. І.[1],пров.інж.

Спектроскопія термічної плазми електродугового розряду між плавкими електродами

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 03022, просп. Глушкова 4Г,
e-mail:[1]murmantsev.aleksandr@gmail.com

O. O. Murmantsev[1], stud.,
A. M. Veklich[1], Dr.Sci., Prof.,
V. F. Boretskij[1], PhD., Associate Prof.,
M. M. Kleshych[1], Eng.,
S. O. Fesenko[1], Assistant Prof.,
G. I. Levada[1], Eng.

Spectroscopy of Thermal Plasma of Electric Arc Discharge Between Melting Electrodes

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 03022, Glushkova Av., 4G
e-mail: [1]murmantsev.aleksandr@gmail.com

Як відомо, під час комутації електричних мереж між електродами та/або контактами перемикачів може виникнути дуговий розряд. І, як наслідок, це може призвести до ерозії контактів, що, у свою чергу, призводить до зменшення терміну експлуатації таких пристроїв. Комбінування тугоплавких компонентів(Mo, Cr, W) та компонентів із високою провідністю(Cu, Ag) дозволяє отримувати матеріали з бажаними експлуатаційними характеристиками, зокрема, в умовах запалювання електричної дуги. Дане дослідження присвячене оптичній спектроскопії термічної плазми вільноіснуючого електродугового розряду силою струму 3,5 та 30 А між асиметричними мідним та композитним Ag-Ni електродами. Така електрична дуга може розглядатися як спрощена модель реальних комутаційних пристроїв електроенергетичної галузі. Дослідження плазми електродугового розряду з домішками парів металів електродного походження спрямовані на підвищення ерозійної стійкості електродів за рахунок оптимізації складу матеріалу та розробки нових технологій їх виготовлення.

Ключові слова: плазма, електродуговийрозряд,електроди,ерозійнівластивості.

It is known that the arc discharge may occur between electrodes and/or contacts during switching of electrical circuits. So, it can lead to contacts' erosion, which, in turn, results in decrease of service time of switches, contactors, etc. Combination of high-melting (Mo, Cr, W) and high-conductivity (Cu, Ag) components allows to obtain materials with high exploitation characteristics under conditions of electric arc. This study deals with optical spectroscopy of thermal plasma of free-burning electric arc discharge between asymmetric copper and composite Ag-Ni electrodes at arc current of 3.5 and 30 A. Such electric arc can be considered as the simplified model of real switching devices of electrical engineering and power industry. The investigation of electric arc discharge plasma with admixtures of metal vapours of electrode origin allow to increase the erosion resistance of electrodes due to optimization of material's composition and development of new technologies of their fabrication.

Key Words: plasma, electric arc discharge, electrodes, erosion properties.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Анісімов І.О.

1. Introduction

Composite materials on copper or silver base are widely used for contacts and electrodes in switching devices for the electrical engineering industry [1], [2]. Exploitation efficiency of switching devices is determined by mass transfer of electrodes materials inside discharge gap. A certain amount of metal vapours in discharge gap is affected by mutual interaction between electrodes material and electric arc plasma, which appeared during switching. Therefore, investigations of such plasma can be useful for optimization of new composite materials, their composition and fabricating technologies [3], [4].

The main aim of this paper is the study of erosion processes of thermal plasma of free-burning electric arc discharge between asymmetric copper and composite Ag-Ni electrodes at current of 3.5 and 30 A by optical spectroscopy.

2. Experimental setup

Vertically oriented free-burning electric arc was initiated between asymmetric copper and composite Ag-Ni electrodes.

Discharge gap in all the experiments was 8 mm. Electrodes were arranged vertically with their ends opposite to each other. Copper cathode was installed above and composite anode – at the bottom. Electric arc plasma parameters were studied at values of discharge currents of 3.5 and 30 A in air.

Arc discharge was powered by stabilized power source of a direct current of 3.5 A. Impulse power source was connected in parallel with a microprocessor control. In order to prevent excessive evaporation and electrical erosion of electrode material, impulses of 30 A current and duration of 30 ms were imposed on "regular" current of 3.5 A. Optical emission registration starts at 7 ms after high-current pulse initiation and remains near 3 ms.

2.1. Measurements of a radial temperature distribution

Optical emission spectroscopy (OES) is used to measure the radial distribution parameters of arc discharge plasma column.

2.1.1. Determination of temperature by spectrometer on the monochromatorbase

For registration of spatial distribution of spectral lines' intensities of plasma emission, optical scheme based on the MDR-12 (Czerny-Turner) monochromator was used. The image of electrical arc was focused in the plane of vertical entrance slit of the monochromator using long focal lens. In order to study the radial-cross-sections of arc, the scheme implements a Dove prism, which rotates the image on 90^0.

In order to process spatial distributions of intensities the special software interface was developed. Since electric arc discharge plasma is non-stabilized in space and time, for every spectral line registration of 30-40 intensity distributions were performed with their following statistical treatment. The interface allows to exclude from consideration the unsymmetrical distributions and distributions that exceeds the CCD sensor's dynamic range. Afterwards, approximation of distribution by Gaussian function and normal averaging of distribution series were performed.

Calculation of the spectral sensitivity was performed exploiting the standard radiation source – calibrated tungsten ribbon lamp. The emission spectrum was registered using the experimental setup, wherein instead of the electrode assembly the given calibration lamp was installed. Spectral sensitivity of the experimental setup was obtained by taking into account the lamp radiation distribution and lamp's glass window transmission coefficient.

2.1.2. Determination of temperature by spectrometer on the spectrograph base

The experimental setup described above for implementation of optical emission spectroscopy using the monochromator as a spectral device ensures registration of a radial intensity distribution of only one spectral line during one registration. Alternatively the original technique was developed, which includes experimental setup based on diffraction spectrograph with CDD matrix for simultaneous registration of electric discharge plasma emission spectra and user interface for experimental data processing.

Image of the spectrum obtained using such experimental setup contains information about spatial distribution of spectral lines' brightness in the working spectral range. Since this setup allows only the side observation of the plasma object, the Abel inversion technique was performed for determination of local emissivity values from the registered intensity distributions. Subsequently, local emissivity distributions were used for the plasma temperature determination by Boltzmann plot technique. This technique is based on measurement of intensities of spectral lines emitted by a separate element, for instance, copper atom. Therefore, significant attention is paid to peculiarities of intensity registration taking into account the spectral sensitivity of the registering device.

2.2. Measurements of a radial electron density distribution

Optical emission spectroscopy commonly uses also the dependency of spectral lines' profile broadening on N_e as a result of the quadratic Stark effect:

$$N_e = K \cdot \Delta\lambda \qquad (1)$$

where$K$– Stark broadening parameter which defines electron density normalized by a line half-width, $\Delta\lambda$ – half-width of a spectral line. Hence, it is required for N_e determination to choose spectral lines with quadratic Stark mechanism of broadening and to study its line profile.

The experimental setup for line profiles' registration consists of the Fabry-Perot interferometer and the MDR-12 monochromator. Optical scheme focuses the image (rotatedon 90^0 by Dove prism) of transversal cross-section of the electric arc discharge plasma channel and forms interferential pattern on the vertical entrance slit of the monochromator[4]. So, width of spectral line in each interferential maximum on this pattern can be used to determine N_e in corresponding spatial point.

2.3. Measurements of a spatial copper vapor distribution

Methods of plasma absorption spectroscopy are based on dependence of emission absorption on plasma object parameters, more specifically on concentration of absorbing particles. High monochromaticity of laser emission ensures spectral selectivity of absorption in plasma object, which allows to determine the concentration of a certain type of absorbing particles. The peculiarity of linear laser absorption spectroscopy technique lies in the possibility of simultaneous determination of two-dimensional spatial distribution of copper's atoms energy level populations.

The laser absorption plasma spectroscopy technique was realized in the experimental setup wherein electric arc discharge plasma was scanned by laser emission at wavelength of Cu I 510.5 nm. Degree of absorption of such emission in plasma is defined by population of $^2D_{5/2}$ energy level of copper atom.

The copper vapours laser "Kriostat 1", operated in pulse mode (10 ns pulse duration, 10 kHz repetition rate), was used as source of the probing emission. Since laser beam diameter exceeded the sizes of plasma object, it was possible to register the absorption distributions in whole plasma region of the discharge gap [5].

3. Results and discussions

3.1. Radial distribution of plasma parameters

In Fig.1 the radial distribution of plasma temperature of arc discharge current 3.5 A, obtained by spectrometer on the monochromator and spectrograph base, is shown. One can see that both spectrometers provide the same results with good accuracy.

In Fig.2 typical Boltzmann plot on the base of Cu I 465.1, 510.5, 515.3, 521.8, 570, 578.2, 793.3, 809.3 nm spectral lines for axis radial point is presented.

In Fig.3 and Fig.4 the radial distribution of plasma temperature and typical Boltzmann plot on the base of Cu I 427.5, 465.1, 510.5, 515.3, 521.8, 570, 578.2, 793.3, 809.3 nm spectral lines for axis radial point at arc current 30 A are shown as well.

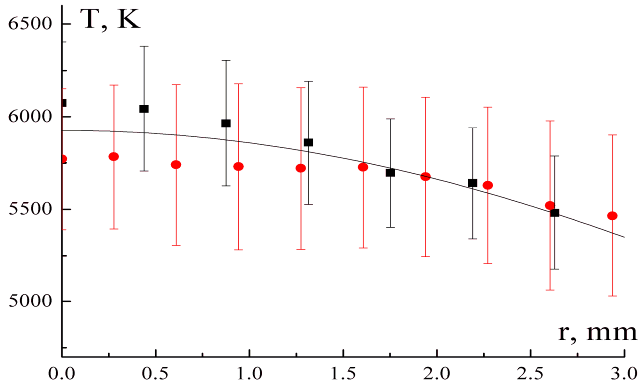


Figure 1. Radial distribution of plasma temperature,arc current 3.5 A■ –monochromator,● –spectrograph.

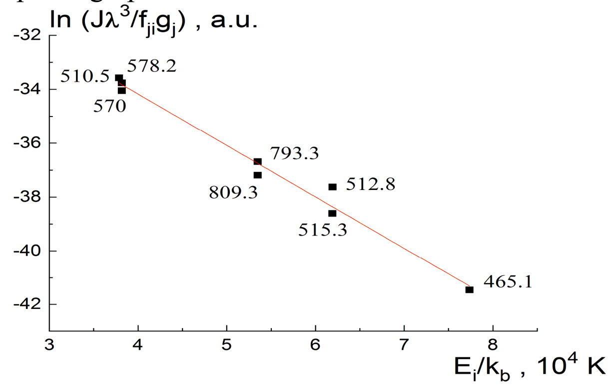


Figure 2. Boltzmann plot of Cu I (r=0 mm),arc current 3.5 A

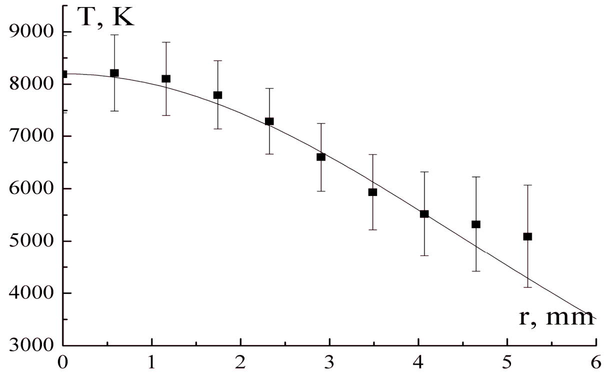


Figure 3. Radial distribution of plasma temperature, arc current 30 A.

In Fig.5 the radial profiles of copper atom concentration obtained by laser absorption spectroscopy (LAS) and calculated in assumption in local thermodynamic equilibrium (LTE) at arc current 3.5 A are presented. One can conclude that such kind assumption in investigated plasma is appropriate.

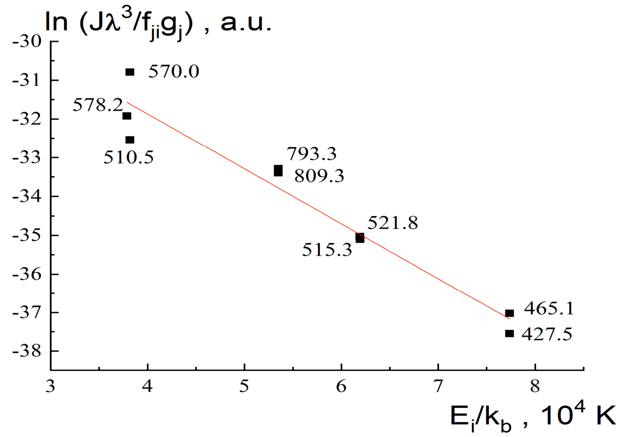


Figure 4. Boltzmann plot of Cu I (r=0 mm),arc current 30 A

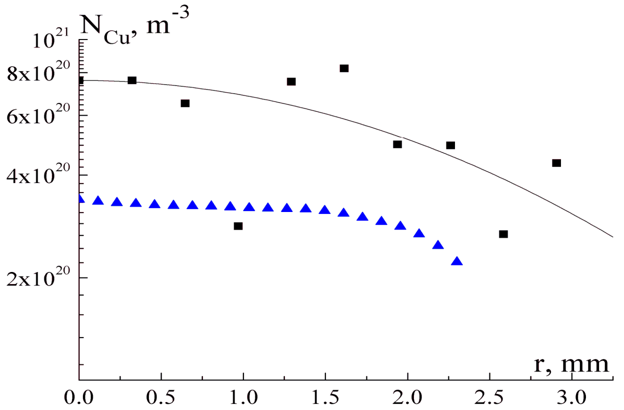


Figure 5. Radial distribution of copper vaporsdensity in plasma, arc current 3.5 A:■– Laser Absorption Spectroscopy (LAS); ▲– obtained from calculation ofequilibrium plasma composition.

In Fig.6 radial distributions of electron density of electric arc discharge plasma at arc current 3.5 A are shown. Radial profiles are obtained by solving of energy balance equation (so called Elenbaas-Heller equation) and calculated in LTE assumption.

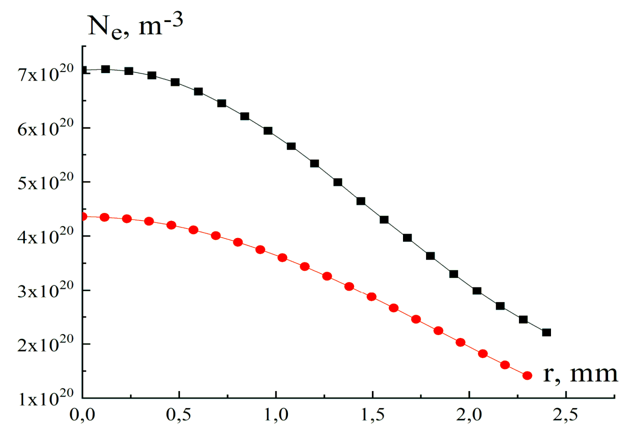


Figure 6. Radial distribution of electron density in plasma, arc current 3.5 A (●– obtained from energy balance equation; ■– obtained by LAS and equilibrium plasma composition calculation).

In Fig.7, Fig.8 typical interferograms of Ag I and Cu I spectral lines, emitted by electric arc discharge plasma at arc current 30 A, are presented.

Corresponding radial profiles calculated from width of both spectral lines, broadened by dominated quadratic Stark effect, are shown in Fig. 9.

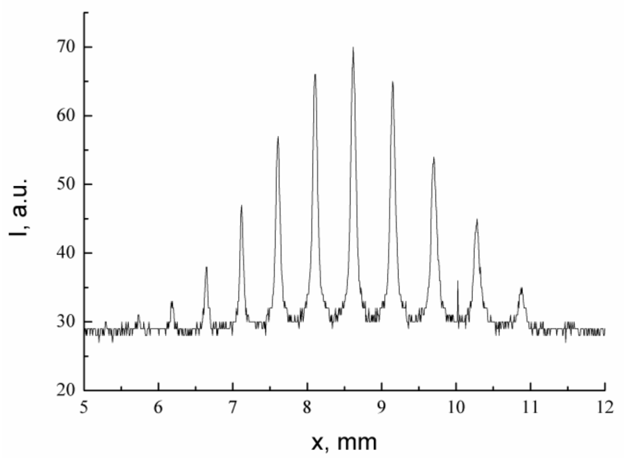


Figure 7. Registered interferogram of spectral line Ag I 447.6 nm.

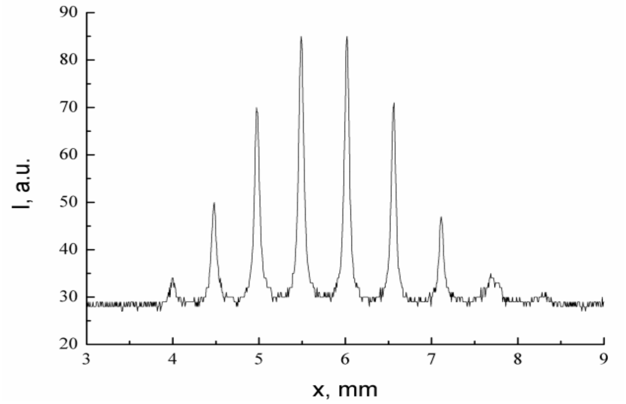


Figure 8. Registered interferogram of spectral line Cu I 515.3 nm.

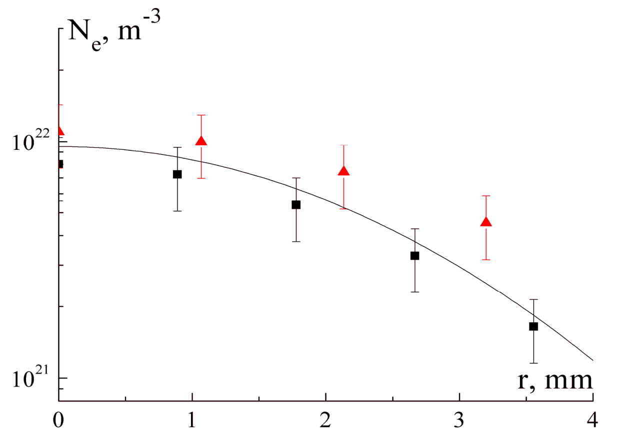


Figure 9. Radial distributions of electron density inplasma, arc current 30 A, obtained from half-widthof spectral lines ▲–Cu I 515.3 nm,■–Ag I 447.6 nm.

3.2. Calculation of plasma composition

In Fig. 10, 12, 14 radial profiles of plasma components calculated in LTE assumption on the base of plasma temperature and electron density as initial data are presented.

The content of metal vapour components (i.e. copper, silver and nickel) can be determined from plasma composition in the following manner:

$$X_{Cu} = \left(N_{cu} + N_{Cu^+}\right)\cdot 100 \Big/ \sum_j N_j \ , \qquad (2)$$

$$X_{Ag} = \left(N_{Ag} + N_{Ag^+}\right)\cdot 100 \Big/ \sum_j N_j \ , \qquad (3)$$

$$X_{Ni} = \left(N_{Ni} + N_{Ni^+}\right)\cdot 100 \Big/ \sum_j N_j \ , \qquad (4)$$

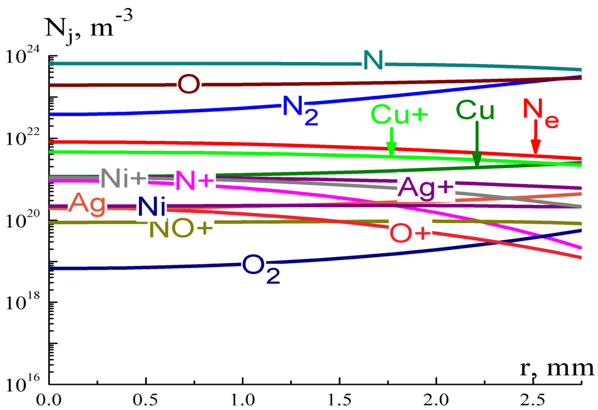


Figure 10. Equilibrium plasma composition for arccurrent 30 A obtained with electron density,plasma temperature and relative intensitiesof Cu I, Ag I, Ni I spectral lines.

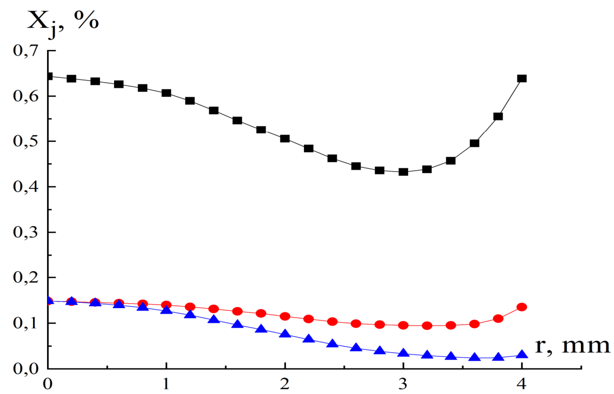


Figure 11. Content of metal vapors in the arc dischargeplasma, current of 30 A: ■ – Cu, ●– Ag, ▲ – Ni(determined with the using of T (r) and N$_e$ (r),with account of NO$^+$).

In Fig. 11, 13, 15 calculated contents of metal component in plasma at arc current 30 A and 3.5 A are presented. One can conclude that erosion property of investigated electrode materials can be examined by proposed approach using optical emission spectroscopy and laser absorption spectroscopy.

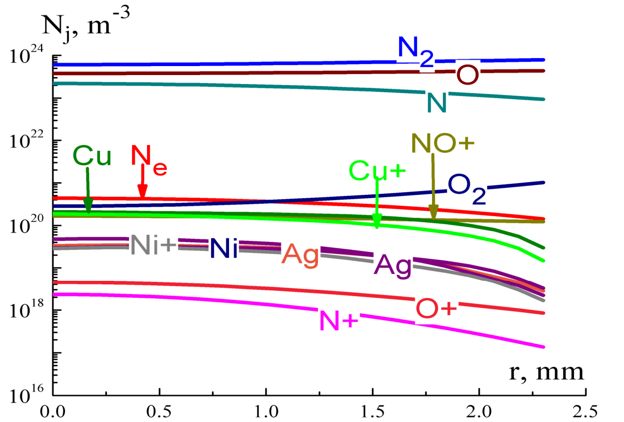


Figure 12. Equilibrium plasma composition for arccurrent 3.5 A obtained with electron density,plasma temperature and relative intensitiesof Cu I, Ag I, Ni I spectral lines.

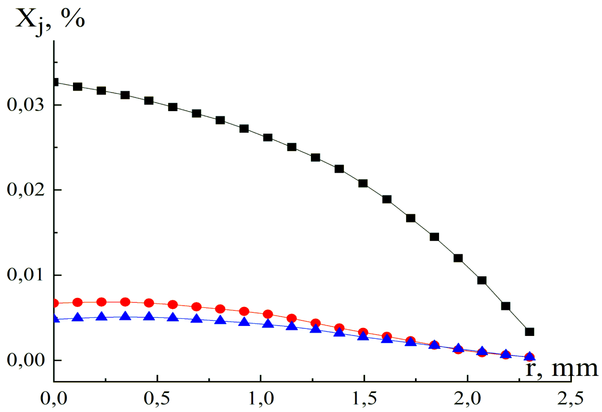


Figure 13. Content of metal vapors in the arc dischargeplasma, current 3.5 A: ■– Cu, ●– Ag, ▲– Ni(determined with the using of T (r) and N$_e$ (r),with account of NO$^+$).

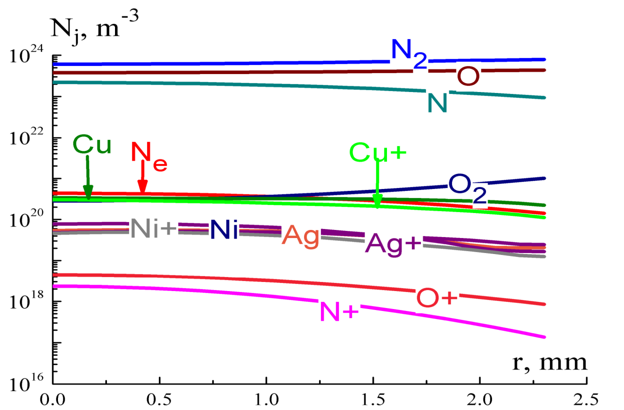


Figure 14. Equilibrium plasma composition for arc current 3.5 A obtained with copper vapors density, plasma temperature and relative intensities of Cu I, Ag I, Ni I spectral lines.

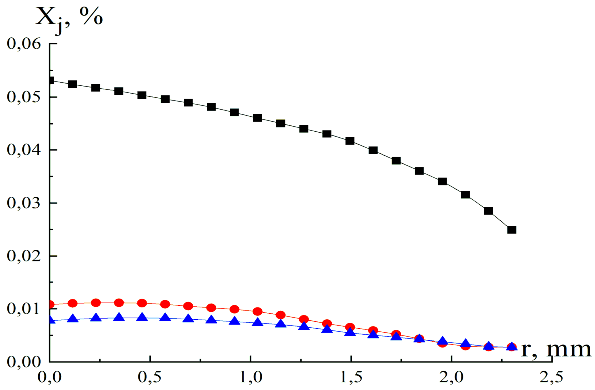


Figure 15. Content of metal vapors in the arcdischarge plasma, current 3.5 A: ■ – Cu, ●– Ag, ▲– Ni (determined with theusing of T (r) and N_e (r), without account of NO^+).

It was found that copper electrode which was used as the cathode in the arc is evaporated more intensively in comparison with composite Ag-Ni anode.

The increasing of electric current leads, naturally, to the erosion increasing of each component of composite material and copper metal as well.

In studies of electric arc plasma at 3.5 A the presence of molecules NO and molecular ions NO^+ obviously must be took into account in calculation of equilibrium plasma composition.

4. Conclusions

The intensity of erosion processes on working surface of asymmetric copper and composite Ag-Ni electrodes inspired by influence of thermal plasma of free-burning electric arc discharge at current of 3.5 A and 30 A by optical spectroscopy is studied.

It was found that copper electrode which was used as the cathode in the arc is evaporated more intensively in comparison with composite Ag-Ni anode.

The increasing of electric current leads, naturally, to the erosion increasing of each component of composite material and copper metal as well.

Списоквикористанихджерел

1. Tsakiris, V. W-Cu composite materials for electrical contacts used in vacuum contactors [Text] / V. Tsakiris, E. Elena, M. Lungu and V. Braic // Optoelectronics and Advanced Material.- 2013.- 15(9).- P. 1090-1094.
2. Ray, N., Effect of Niaddition of the contact resistance of Ag-WC electrical contacts [Text] / N. Ray, B. Kempf, T. Maijtzel, F. Heringhaus, L. Froyen, K. Vanmeensel and J. Vleugels // Alloys and Compounds.- 2016.- 640(4).-P. 188-197.
3. Бабич, I. Плазмаелектричноїдугиміжелектродами з композиційнихматеріалів[Текст] /І. Бабич, В. Борецький, Р. Мінакова, А. Веклич// Питанняатомноїнауки і техніки.- 2008.- 13(6).- С.159-161.
4. Babich, I. Spectroscopic data and stark broadening of Cu I and Ag I spectral lines. Selection on analysis [Text] / I. Babic, V. Boretskij, A. Veklich, and R. Semenyshyn // Advances in Space Research.- 2014.- 110(54).-P.1254-1263.
5. Semenyshyn, R. Spectroscopy peculiarities of thermal plasma of electric arc discharge between electrodes with Zn admixtures [Text] / R. Semenyshyn, A. Veklich, I. Babich, V. Boretskij // Advances in Space Research.- 2014.- 110(54).- P.1235-1241.

References

1. TSAKIRIS, V., ELENA, E., LUNGU, M. and BRAIC, V. (2013) W-Cu composite materials for electrical contacts used in vacuum contactors. *Optoelectronics and Advanced Material. 15(9). p.1090-1094.*
2. RAY, N., KEMPF, B., MAIJTZEL, T., HERINGHAUS, F., FROYEN, L., VANMEENSEL, K. and VLEUGELS, J. (2016) Effect of Niaddition of the contact resistance of Ag-WC electrical contacts. *Alloys and Compounds. 640(4). p. 188-197.*
3. BABICH, I., BORETSKIJ, V., MINAKOVA, R. and VEKLICH, A. (2008) Plasma of electric arc between electrodes from composite materials.*Problems of Atomic Science and Technology. 13(6). p.159-161.*
4. BABICH, I., BORETSKIJ, V., VEKLICH, A. and SEMENYSHYN, R. (2014) Spectroscopic data and stark broadening of Cu I and Ag I spectral lines. Selection on analysis. *Advances in Space Research. 110(54). p.1254-1263.*
5. SEMENYSHYN, R., VEKLICH, A., BABICH, I., BORETSKIJ, V. (2014) Spectroscopy peculiarities of thermal plasma of electric arc discharge between electrodes with Zn admixtures. *Advances in Space Research. 110(54). p.1235-1241.*

Надійшла до редколегії 22.11.2018

СУЧАСНА ФІЗИКА

УДК 524.83

Камарпур М.[1]**, асп.**

Інфляційний магнетогенезис

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: mehrankamarpour@yahoo.com

M. Kamarpour[1]**, PhD stud.**

Inflationary magnetogenesis

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: mehrankamarpour@yahoo.com

Зроблено огляд генерації первинних магнітних полів в ранньому Всесвіті в інфляційних моделях. Розглянуто інфляційні моделі з повільним скочуванням і моделлю Ратри з кінетичною взаємодією $f^2(\phi)FF$ інфлатонного поля ϕ з електромагнітним полем. Вивчено магнетогенезис під час інфляції і прехітінгу в R^2 моделі Старобінського. Досліджено також інфляційний магнетогенезис в моделі природної інфляції з одним інфлантонним полем чиї параметри вибрані у відповідності з нещодавніми спостереженнями колаборації Planck [3]. Конформна інваріантність максвелівської дії порушена кінетичним зв'язком із інфлантонним полем і константою зв'язку як функцією масштабного фактору, $f(\phi) \propto a^{\alpha}$, і $\alpha < 0$ використано для того щоб уникнути проблеми сильного зв'язку. Для таких α, електрична компонента густини енергії домінує порівняно з магнітною компонентою густини енергії і для $\alpha \lesssim -2.2$ призводить до сильної зворотної реакції, яка порушує інфляцію і припиняє підсилення магнітного поля. Знайдено, що магнітні поля згенеровані у відсутності проблеми сильної зворотної реакції не можуть перевищувати значення $\sim 10^{-20}$ G в сучасну епоху, а їх спектр має блакитний нахил.
Ключові слова: магнітні поля, ранній Всесвіт

We review the generation of primordial magnetic fields in the early Universe in inflation models. We consider slow-roll inflation models with the Ratra model by assuming the kinetic coupling $f^2(\phi)FF$ of the inflation field ϕ R^2
Starobinsky model is studied. We investigate also the inflationary magnetogenesis in the natural single-field inflation model whose parameters are chosen in accordance with the recent observations by the Planck collaboration [3]. The conformal invariance of Maxwell action is broken by kinetic coupling with the inflation field and the coupling function as a power of a scale factor, $f(\phi) \propto a^{\alpha}$, and $\alpha < 0$ is used in order to avoid the strong coupling problem. For such α, the electric component of the energy density dominates the magnetic one and, for $\alpha \lesssim -2.2$, it causes strong back-reaction which can spoil inflation and terminate the enhancement of the magnetic field. It is found that the magnetic fields generated in the absence of the back-reaction problem cannot exceed $\sim 10^{-20}$ G at the present epoch and their spectrum has a blue tilt.
Key Words: magnetic fields, early Universe

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

1. Introduction

Magnetic fields are present on various scales in the Universe. Observations show that stars, galaxies, and clusters of galaxies are all magnetized. The typical magnetic field strengths range from a few μG in the case of galaxies and galaxy clusters up to $10^{15} G$ in magnetars (see,e.g., Refs.[6,10-15]).Magnetic fields are observed also in galaxies at cosmological distances. Observations of the cosmic microwave background (CMB) [3,16] and the gamma rays from blazars [17-20] imply the upper and lower bounds on the strength of the present large-scale magnetic fields B_0 given by $10^{-17} \lesssim B_0 \lesssim 10^{-9}$ G. During inflation scalar density perturbations [6,8] and tensor perturbations (gravitational waves) are generated and stretched to cosmological scales[7]. This creates considerable density inhomogeneities evolving later into the large-scale structure of the observed Universe [28-32] or relic gravitational waves [7,8,33]. However, fluctuations of electromagnetic fields are not generated because they are conformally invariant [9]. There are generally two approaches to the origin of the magnetic fields (see refs [12-15]). One possibility is to generate magnetic fields by means of purely astrophysical phenomena. However, the observation of large-scale magnetic fields in voids [17-20] supports the primordial origin of magnetic fields.

Cosmological phase transitions could be considered as one of the possible scenarios of producing primordial magnetic fields [21-26].However, since the comoving coherence length of magnetic fields cannot exceed the Hubble horizon at the time of a phase transition, it is much smaller than M_{pc}today. Consequently, the most natural mechanism for the generation of the large-coherence-scale magnetic fields is inflation in the early Universe [27] through the exponential stretching of wave modes during very rapid accelerated expansion.

As was first formulated by Turner and Widrow [27], inflationary magnetogenesis proceeds through the amplification of small quantum perturbations due to the expansion of the Universe. As mentioned above, in order to generate large scale magnetic fields, the conformal invariance of the theory should be broken. By coupling electromagnetic field to a scalar or pseudo scalar field or to curvature invariant, it is possible to generate magnetic fields. Although there are many ways to break the conformal invariance of the electromagnetic action during inflation [34-38], we consider in our paper only the kinetic coupling model$f^2(\phi)FF$ firstly introduced by Ratra [34], where f is a function of the inflation field ϕ and F is the electromagnetic field tensor. According to the most recent observational data by the Planck Collaboration [3] , the R^2 model proposed by Starobinsky [39] is one of the most favored among the models of inflation. For example, the chaotic inflationary models like the large fields inflation are disfavored due to their high tensor-to-scalar ratio [40]. In this review paper, we consider the mechanisms of magnetic field generation in the early Universe by studying the Ratra model and the natural inflationf^2FF model.

2. Inflation in the early Universe and electrodynamics in curved space-time

A. Cosmology and inflation

Historically inflation was proposed as a solution of a number of problems in the Big Bang theory [55] such as:
1-The flatness problem.
2- The horizon problem.
3- The monopole problem.

Let us see how inflation alleviates these problems. The rate of expansion of the Universe is given by the Hubble parameter $H = \frac{\dot{a}}{a}$ and $\eta = \int \frac{dt}{a}$ is the conformal time. The Hubble time H^{-1} is of the crucial importance because it typically takes one Hubble time for the Universe to expand appreciably.

The flatness problem

The Friedman equation with a cosmological constant Λ reads

$$H^2 = \frac{8\pi G\rho}{3} - \frac{K}{a^2} + \frac{\Lambda}{3}, \qquad (1)$$

where $K = 0$ corresponds for a flat geometry (zero spatial curvature). It is convenient to use

$$\Omega(t) = \frac{\rho}{\rho_c} \qquad (2)$$

$$\Omega_\Lambda = \frac{\Lambda}{3H^2} \qquad (3)$$

Here ρ_c is the critical density,Ω is the **density parameter**, and Λ is the cosmological constant. The **critical density** ρ_c is defined by

$$\rho_c(t) = \frac{3H^2}{8\pi G} \qquad (4)$$

The **flatness problem** comes from the Friedman equation in a Universe with matter and radiation when the cosmological constant is absent

$$|\Omega_{tot}(t) - 1| = \frac{|K|}{a^2H^2} \qquad (5)$$

Since $\frac{|K|}{a^2H^2}$ always increases in time as the Universe expands, this forces Ω_{tot} away from the unity. The curvature radius of the **Friedmann-Robertson-Walker**(FRW) Universe with the metric $ds^2 = -dt^2 + a^2(t)\left[\frac{dr^2}{1-kr^2} + r^2(d\theta^2 + \sin^2\theta\, d\phi^2)\right]$ is given by

$$R_K^{-2} = \frac{|K|}{a^2} = H^2|\Omega_{tot} - 1| \qquad (6)$$

The ratio of the Hubble radius to the curvature scale is determined by Ω_{tot} and equals

$$\frac{H^{-1}}{R_K} = |\Omega_{tot} - 1|^{\frac{1}{2}} \qquad (7)$$

The energy density of the Universe at the present time is close to the critical density. According to observations, $\Omega_{tot} = 1$ with accuracy 1%.

Inflation: Definition

The flatness problem can be solved during the inflation era by means of repulsive gravity. This leads to an accelerated expansion in the very early Universe $\ddot{a} > 0$. The equation for the scale factor

$$\frac{\ddot{a}}{a} = -4\pi G(\rho + 3P),\ c = 1 \qquad (8)$$

Implies that, $\ddot{a} > 0$ when the right-hand side of the above equation is positive. Thus, inflation needs P

$< -\frac{\rho}{3}$.During inflation the **Hubble parameter is almost constant**. The energy-momentum conservation equation reads

$$\dot{\rho} + 3H(\rho + P) = 0 \tag{9}$$

Parameterizing the equation of state as

$$P = \omega\rho \tag{10}$$

We have

$$\dot{\rho} + 3H(\rho + \omega\rho) = 0 \tag{11}$$

This gives

$$\rho \propto a^{-3(1+\omega)} \tag{12}$$

And

$$a \propto t^2/(3+3\omega), \omega \neq -1 \tag{13}$$

For, $\omega = -1$, the matter density does not depend on time, i.e., $\dot{\rho} = 0$. Further, we have

$$H^2 = \frac{8\pi G\rho}{3} - \frac{K}{a^2} + \frac{\Lambda}{3}$$

$$\rightarrow H^2 \approx \frac{\Lambda}{3} \rightarrow \dot{a} \approx \sqrt{\frac{\Lambda}{3}}a \tag{14}$$

We have

$$a \propto e^{Ht}, \omega = -1 \tag{15}$$

Solution of the flatness problem

In order to solve flatness problem, the right-hand side of Eq.(16) should decrease with the expansion of the Universe. According to Eq.(5) Ω_{tot} evolves towards one rather than away from one if $\frac{d(aH)}{dt} > 0$. Since

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{aH}\right) = \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\dot{a}}\right) = -\frac{\ddot{a}}{\dot{a}^2} < 0 \tag{16}$$

inflation naturally solves the flatness problem.

The horizon problem

The horizon problem is connected with the question why the early Universe is so homogeneous. CMB observations tell us that the microwave radiation coming from opposite sides of the sky have the same temperature. The problem is that the emission regions are not in causal contact. The co-moving distance that light can travel from the Big Bang to time t, i.e., the **particle horizon**, is given by

$$\int dr = \eta = \int_0^t \frac{dt}{a(t)} \tag{17}$$

At the time of recombination η_* is about 300 Mpc. Therefore, we expect to see correlations over patches with co-moving radius smaller than about 300 Mpc. The corresponding angular size angular size on the sky is about $300/1400 \sim 1^\circ$. No causal process could have generated correlation seen on larger scale!

Solution to the horizon problem

The **horizon problem** stems from the existence of particle horizons in FRW cosmologies (see Eq.(17)). Horizons exit in view of finite time since the Big Bang that light can travel. According to Eq.(13), we have for a constant equation of state

$$\eta \propto \int t^{-2/(3+3\omega)}\, dt \tag{18}$$

For $< -\frac{1}{3}$, regions with very large distances have been in causal contact in the early Universe.

Origin of the fluctuations

The CMB data show small fluctuations in temperature. Theory of inflation explains the origin of fluctuations in terms of quantum fluctuations in the very early Universe. We will return to this problem in next sections.

How much inflation we need?

The amount of inflation or the amount by which the universe inflates is given by the number of e-folding, N, so that the scale factors before and after inflation are related by following relation:

$$\frac{a(t_f)}{a(t_i)} = e^N \tag{19}$$

Rewriting this relation in terms of the Hubble parameter, we obtain

$$H = \frac{\dot{a}}{a} \rightarrow \int_{t_i}^{t_f} H dt = \mathrm{N} \tag{20}$$

We rewrite this relation in terms of slow-roll parameters in the next section.

B. Equations of the slow-roll regime

We have seen that an era of inflationary expansion with $\omega < -\frac{1}{3}$ can solve the flatness and horizon problems. A cosmological constant with $\omega = -1$ can solve these problems too but inflation will never end in this case. A conventional way to realize an inflationary phase in the very early universe is provided by the vacuum energy contribution due to the potential of a scalar field. This easily makes possible to satisfy the negative pressure condition. For the time being we introduce a single field which is the inflation. We will consider its coupling with the electromagnetic field later. The Lagrangian of a scalar field interacting with the gravitational field governing the standard Hilbert--Einstein action reads as

$$L_\varphi = \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - V(\varphi) \tag{21}$$

The action in General relativity is given by following equation

$$S = \int d^4x\sqrt{-g}\left\{-\frac{R}{16\pi G} + \mathcal{L}_\varphi\right\} \quad (22)$$

Where R is Ricci scalar, g is determinant of the metric tensor, and

$$L_\varphi = \frac{1}{2}\partial_\mu\varphi\partial^\mu\varphi - V(\varphi)$$

is the Lagrangian of the scalar field. Varying this action with respect to metric, we find the Einstein equations

$$G_{\mu\nu} = R_{\mu\nu} - \frac{1}{2}g_{\mu\nu}R = 8\pi G T_{\mu\nu} \quad (23)$$

With the energy-momentum tensor

$$T^{\mu\nu} = -\frac{2}{\sqrt{-g}}\frac{\partial(\mathcal{L}_\varphi\sqrt{-g})}{\partial g_{\mu\nu}} = -2\frac{\partial\mathcal{L}_\varphi}{\partial g_{\mu\nu}} - g^{\mu\nu}\mathcal{L}_\varphi \quad (24)$$

In an isotropic and homogeneous Universe, the density and pressure are determined by $\rho = T_0^0$ and $T_j^i = -p\delta_j^i$.

The equation of motion for the homogeneous scalar field has the form

$$\ddot{\varphi} + 3H\dot{\varphi} + \frac{dV(\varphi)}{d\varphi} = 0 \quad (25)$$

According to Eq.(24), the energy density and pressure are given by

$$\rho_\varphi = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 + V(\varphi) \quad (26)$$

$$p_\varphi = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 - V(\varphi) \quad (27)$$

The Friedman equation is

$$3{M_{pl}}^2H^2 = \frac{1}{2}\dot{\varphi}^2 + V(\varphi) \quad (28)$$

Where we used the reduced Planck mass system ${M_{pl}}^2 = \hbar c/(8\pi G)$. If the field rolls slowly, then H is nearly constant. Therefore, the potential energy dominates over the kinetic one and we can neglect $\dot{\varphi}$ in the Friedman equation (28).If $\dot{\varphi}^2 \ll V_{,\varphi}$, then $2\dot{\varphi}\ddot{\varphi} \ll V_{,\varphi}\dot{\varphi}$ and we can neglect the second derivative of φ in Eq. (25).

C. Slow-roll approximation

In such a case, one can make the following approximations:

$$3M_{pl}^2H^2 = V \quad (29)$$

$$3H\dot{\varphi} = -V_{,\varphi} \quad (30)$$

Differentiating the Friedman equation (28) with respect to time and substituting the result into Eq.(25), we find a useful relation

$$2{M_{pl}}^2\dot{H} = -\dot{\varphi}^2 \quad (31)$$

Since $\dot{\varphi}$ does not change much in the Hubble time, we can rewrite the condition for inflation as follows

$$-\frac{\dot{H}}{H^2} < 1 \quad (32)$$

The slow-roll approximation corresponds to $\frac{|\dot{H}|}{H^2} \ll 1$. Then inflation is almost exponential and we can work with this relation in order to define the number of e-foldings and determine the condition when inflation ends.

The number of e-foldings

We have

$$\int_{t_1}^{t_f} H dt = N \quad (33)$$

By using the slow-roll approximation and Eqs.(29,30), we find

$$N = -\frac{1}{{M_{pl}}^2}\int_{\varphi_i}^{\varphi_{end}}\frac{V}{V_{,\varphi}} \quad (34)$$

Thus, the number of e-foldings is given by Eq.(34) which essentially gives the range of φ for observable inflation. Typically, $N > 40 - 60$ is sufficient to solve the horizon and flatness problems. For an almost exponential inflation to $\frac{|\dot{H}|}{H^2} \ll 1$, it is convenient to define the slow-roll parameter

$$\epsilon = -\frac{\dot{H}}{H^2} = \frac{1}{{M_{pl}}^2}\frac{(V_{,\varphi})^2}{9H^2} \quad (35)$$

or, equivalently, [59]

$$\epsilon = \frac{M_{pl}^2}{2}\left(\frac{V_{,\varphi}}{V}\right)^2 \qquad \epsilon(\varphi) \ll 1 \quad (36)$$

$\epsilon < 1$ is required for inflation and inflation ends when $\epsilon = 1$. By using Eq.(30) and taking derivative with respect to time, we find another slow-roll parameter[59]

$$\eta \equiv M_{pl}^2\frac{V_{,\varphi\varphi}}{V} \approx \frac{V_{,\varphi\varphi}}{3H^2} \quad (37)$$

Where $V_{,\varphi\varphi} = \frac{d^2V}{d\varphi^2}$. The inequality $\frac{|\dot{H}|}{H^2} \ll 1$ and Eqs.(29) and (30) are known as the slow-roll approximations which imply the slow-roll conditions (36) and (37) on the potential of the scalar field. In order that the slow-roll approximation be self-consistent, we need that both ϵ and η should be small

$$\epsilon \ll 1 \text{ and } \eta \ll 1 \quad (38)$$

This means that the inflation potential should be very flat.

D. Inflation perturbations

First order perturbation theory

The equation of motion for the inflation field in the momentum space is given by

$$\ddot{\varphi}(\vec{k},t)+3H\dot{\varphi}(\vec{k},t)+\frac{k^2}{a^2}\varphi(\vec{k},t)+\frac{dV}{d\varphi(\vec{k},t)}=0 \quad (39)$$

Splitting the inflation field into the background one $\phi(t)$and a small perturbation $\delta\phi$, obviously, the latter is governed by the following equation:

$$\delta\ddot{\varphi}(\vec{k},t)+3H\delta\dot{\varphi}+\frac{k^2}{a^2}\delta\varphi(\vec{k},t)+V_{,\varphi\varphi}\delta\varphi(\vec{k},t)=0 \quad (40)$$

Ignoring $V_{,\varphi\varphi}$ because it is much less than H^2 and much less than $\frac{k^2}{a^2}$, we obtain

$$\delta\ddot{\varphi}(\vec{k},t)+3H\delta\dot{\varphi}+\frac{k^2}{a^2}\delta\varphi(\vec{k},t)=0 \quad (41)$$

In the conformal time $\eta=\int_{t_i}^{t_f}\frac{dt}{a}$, we have

$$\frac{1}{a^2}\frac{d^2(\delta\varphi)}{d\eta^2}+2\frac{H}{a}\frac{d(\delta\varphi)}{d\eta}+\frac{k^2}{a^2}\delta\varphi=0 \quad (42)$$

In terms of $\phi=a\delta\varphi$ after a little algebra, we obtain

$$\frac{d^2\phi}{d\eta^2}-2a^2H^2\phi+k^2\phi=0 \quad (43)$$

Obviously, the above equation has the form of the harmonic oscillator equation

$$\frac{d^2\phi(\vec{k},\eta)}{d\eta^2}+\omega^2(\eta)\phi(\vec{k},\eta)=0 \quad (44)$$

With frequency $\omega^2=k^2-2a^2H^2$. Its solution is given by

$$\phi_k(\eta)=\frac{e^{-ik\eta}}{\sqrt{2k}}\frac{(k\eta-i)}{k\eta} \quad (45)$$

Which approaches

$$\phi_k(\eta)=-\frac{i}{\sqrt{2k}}\frac{1}{k\eta} \quad (46)$$

at the horizon exit.

E. The Maxwell equations in curved space-time

In order to discuss the generation of primordial magnetic fields and their subsequent evolution, we first review the Maxwell equations in curved space-time.

$$F_{\mu\nu\,;\sigma}+F_{\sigma\mu;\nu}+F_{\nu\sigma;\mu}=0 \qquad F^{\mu\nu}{}_{;\mu}=J^{\nu} \quad (47)$$

Here the field strength tensor is given by

$$F_{\mu\nu}=A_{\nu;\mu}-A_{\mu;\nu} \quad (48)$$

And the covariant derivatives are defined in the standard way

$$V_{\mu;\nu}=\frac{\partial V_\mu}{\partial x^\nu}-\Gamma^{\lambda}{}_{\mu\nu}V_\lambda\,,V^{\mu}{}_{;\nu}=\frac{\partial V_\mu}{\partial x^\nu}+\Gamma^{\lambda}{}_{\mu\nu}V_\lambda \quad (49)$$

Further,

$$V_{\mu;\nu}-V_{\nu;\mu}=\frac{\partial V_\mu}{\partial x^\nu}-\frac{\partial V_\nu}{\partial x^\mu} \quad (50)$$

In curved space-time, it is useful to decompose $F_{\mu\nu}$ in terms of the electric and magnetic fields by using the observer`s proper four velocity U^μ . It is given by

$$F_{\mu\nu}=U_\mu E_\nu-U_\nu E_\mu+\epsilon_{\mu\nu\alpha\beta}B^\alpha U^\beta. \quad (51)$$

For $\tilde{F}^{\alpha\beta}$, we have

$$\tilde{F}^{\alpha\beta}=\frac{1}{2}\epsilon^{\alpha\beta\mu\nu}F_{\mu\nu}=\epsilon^{\alpha\beta\mu\nu}U_\mu E_\nu+\left(U^\alpha B^\beta-B^\alpha U^\beta\right) \quad (52)$$

In terms of $\vec{B}^*=a^2\vec{B}$, $\vec{E}^*=a^2\vec{E}$, $\vec{J}^*=a^3\vec{J}$ and $\rho^*=a^3\rho$, the Maxwell equations in the conformal time has the form

$$\frac{\partial\vec{B}^*}{\partial\eta}+\nabla\times\vec{E}^*=0\,,\nabla\cdot\vec{B}^*=0 \quad (53)$$

$$\nabla\times\vec{B}^*-\frac{\partial\vec{E}^*}{\partial\eta}=\vec{J}^*\,,\nabla\cdot\vec{E}^*=\rho^* \quad (54)$$

The above equations imply the standard wave equations for the electric and magnetic fields in vacuum

$$\frac{\partial^2\vec{E}^*}{\partial t^2}-\nabla^2\vec{E}^*=0\,,\frac{\partial^2\vec{B}^*}{\partial t^2}-\nabla^2\vec{B}^*=0 \quad (55)$$

F. Quantization of electromagnetic field

The quantization of the of the electromagnetic field is achieved by imposing the canonical commutation relations

$$\left[A_i(t,\vec{x}),\pi_j(t,\vec{y})\right]=i\int\frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3}e^{\left(i\vec{k}\cdot(\vec{x}-\vec{y})\right)}\Delta_{ij} \quad (56)$$

Where $\Delta_{ij}=\delta_{ij}-k_ik_j/\vec{k}^2$ and $\pi_j=\dot{A}_j$. The electromagnetic field can be expanded in terms of the creation and annihilation operators $a_\lambda^\dagger(\mathbf{k})$ and $a_\lambda(\mathbf{k})$

$$A_i(t,\vec{x})=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}\sqrt{2k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\epsilon_{i\lambda}(\vec{k})\times\left[a_\lambda(\vec{k})exp(ikx)+a_\lambda^\dagger(\vec{k})exp(-ikx)\right] \quad (57)$$

Where $\epsilon_{i\lambda},\lambda=1,2$ are the polarization vectors in Coulomb gauge $\phi=A_0=\partial_iA^i=0$. The polarization vectors $\epsilon_{i\lambda}$ obey the completeness relation

$$\Delta_{ij}=\delta_{ij}-k_ik_j/\vec{k}^2=\sum_{\lambda=1}^{2}\epsilon_{i\lambda}(\vec{k})\epsilon_{j\lambda}(\vec{k}) \quad (58)$$

The creation and annihilation operators satisfy the standard commutation relations

$$\left[a_\lambda(\vec{k}),a_{\lambda}^\dagger(\vec{\acute{k}})\right]=(2\pi)^3\delta^3\left(\vec{k}-\vec{\acute{k}}\right)\delta_{\lambda\acute{\lambda}} \quad (59)$$

3. Ratra Model

In order to study the generation of magnetic fields during inflation, we will consider the model introduced by Ratra[34]. Its action is given by

$$S=\int d^4x\sqrt{-g}\left[\frac{1}{2}g^{\mu\nu}\partial_\mu\phi\partial_\nu\phi-V(\phi)\right]$$
$$-\frac{1}{4}\int d^4x\sqrt{-g}\left[g^{\mu\alpha}g^{\nu\beta}f^2(\phi)F_{\alpha\beta}F_{\mu\nu}\right] \quad (60)$$

The equations of motion for the inflation and electromagnetic fields are

$$\partial_\mu\left[\sqrt{-g}g^{\mu\nu}\partial_\nu\phi\right]-\sqrt{-g}\frac{dV(\phi)}{d\phi}$$
$$=\sqrt{-g}\,\frac{1}{2}f(\phi)\frac{df(\phi)}{d\phi}F^{\mu\nu}F_{\mu\nu} \quad (61)$$

$$\partial_\mu\left[\sqrt{-g}g^{\mu\alpha}g^{\nu\beta}f^2(\phi)F_{\alpha\beta}\right]=0 \quad (62)$$

We will neglect the back-reaction of the created electromagnetic fields on the inflation dynamics. Therefore, in what follows, we omit the right-hand side of Eq.(61). For electromagnetic field, we have in conformal time

$$A_\nu''+2\frac{f'}{f}A_\nu'+a^2\partial_i\partial^iA_\nu=0 \quad (63)$$

For the inflation field, we obtain

$$\phi''+2\mathcal{H}\phi'+a^2\frac{dV}{d\phi}=0 \quad (64)$$

In order to satisfy the canonical commutation relations for the scalar and electromagnetic fields, we impose the following relations for their mode functions:

$$a^2\left(\omega_k\frac{d\omega_k'^{*}}{d\eta}-\omega_k{}^{*}\frac{d\omega_k'}{d\eta}\right)=i \quad (65)$$

$$a^3\left(A(t,k)\frac{dA^*(t,k)}{dt}-\frac{dA(t,k)}{dt}A^*(t,k)\right)=i \quad (66)$$

It is convenient to use the mode function $\mathcal{A}(t,k)=a(t)f(t)A(t,k)$ which satisfies the equation [2,15,40]

$$\ddot{\mathcal{A}}(t,k)+H\dot{\mathcal{A}}(t,k)+$$
$$\left(\frac{k^2}{a^2(t)}-H\frac{\dot f}{f}-\frac{\ddot f}{f}\right)\mathcal{A}(t,k)=0 \quad (67)$$

or in the conformal time

$$\mathcal{A}''(\eta,k)+\left(k^2-\frac{f''}{f}\right)\mathcal{A}(\eta,k)=0 \quad (68)$$

A. Energy density of magnetic field

By making use of the definition of the electric and magnetic fields for a co-moving observer with the proper velocity $U^\mu=(1,\vec{0})$

$$E_\mu=U^\nu F_{\mu\nu}\,,\,B_\mu=\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}F^{\nu\rho}U^\sigma \quad (69)$$

Where $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ is the unit completely antisymmetric tensor with $\eta_{0123}=\sqrt{-g}$, we find the following expressions for the electric and magnetic fields in the Coulomb gauge:

$$E_i=\dot{A}_i\,,B_i=\frac{1}{a}\epsilon_{ijk}\partial_jA_k \quad (70)$$

Where ϵ_{ijk} is the unit completely antisymmetric tensor in three spatial dimensions with $\epsilon_{ijk}=1$. For the energy density of the electromagnetic field, we find

$$T_{00}=-\frac{1}{4}a^2g^{\mu\alpha}g^{\nu\beta}f^2(\phi)F_{\alpha\beta}F_{\mu\nu}=\frac{f^2(\phi)}{2}a^2B_\mu B^\mu \quad (71)$$

In above equation we used the fact that the contribution of ∂_0A_i only depends on electric field. Thus, the energy density of magnetic field $\rho_B=-\langle T_0^0\rangle$ equals

$$\rho_B(t)=\int_0^{+\infty}\frac{dk}{k}\frac{d\rho_B(t,k)}{d\ln k}$$
$$=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{+\infty}\frac{dk}{k}\left(\frac{k}{a(t)}\right)^4k|\mathcal{A}(t,k)|^2 \quad (72)$$

In terms of $\mathcal{A}=a(\eta)f(\eta)A(\eta)$, we obtain

$$\rho_B(t)=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{+\infty}\frac{dk}{k}k^5\frac{1}{a^4(\eta)}|\mathcal{A}(\eta,k)|^2 \quad (73)$$

B. Power Spectrum

Electromagnetic fields generated in the early Universe are conventionally characterized by their power spectrum. In order to define what the power spectrum is, we consider a random field $f$with zero average value $\langle f(\vec{x})\rangle$ =0. Its two point correlator is defined as a path integral over field configurations

$$\xi(\vec{x},\vec{y})=\langle f(\vec{x})f(\vec{y})\rangle=\int\mathcal{D}fP_r[f]f(\vec{x})f(\vec{y}) \quad (74)$$

If the system is statistically homogeneous in space, then the correlator is translation invariant, i.e.,

$$\xi(\vec{x},\vec{y})=\xi(\vec{x}-\vec{y}) \quad (75)$$

If, in addition, there is a *statistical isotropy*, then the two-point correlator depends only on the relative distance between the two points

$$\xi(\vec{x},\vec{y})=\xi(|\vec{x}-\vec{y}|) \quad (76)$$

In the momentum space, we have

$$\langle f(\vec{k})f^*(\vec{k})\rangle=F(k)\delta\left(\vec{k}-\vec{k}\right) \quad 77)$$

Where $k=|\mathbf{k}|$.
The power spectrum function is defined by

$$\langle f(\vec{k}) f^*(\vec{\tilde{k}}) \rangle = \frac{2\pi^2}{k^3} \mathcal{P}_f(k)\, \delta(\vec{k} - \vec{\tilde{k}}) \quad (78)$$

The normalization factor in definition of the power spectrum is conventional and has the virtue of making power spectrum dimensionless if the field is dimensionless.

Let us relate the power spectrum of a scalar field to its mode function. By definition, we have

$$\langle 0 \left| \hat{\phi}(\eta, \vec{k}) \hat{\phi}^\dagger(\eta, \vec{\tilde{k}}) \right| 0 \rangle = \frac{2\pi^2}{k^3} \mathcal{P}_\phi(k)\, \delta(\vec{k} - \vec{\tilde{k}}) \quad (79)$$

On the other hand,

$$\langle 0 \left| \hat{\phi}(\eta, \vec{k}) \hat{\phi}^\dagger(\eta, \vec{\tilde{k}}) \right| 0 \rangle = |\phi_k(\eta)|^2\, \delta(\vec{k} - \vec{\tilde{k}}) \quad (80)$$

Thus, the power spectrum of ϕ equals

$$\mathcal{P}_\phi(k) = \frac{k^3}{2\pi^2} |\phi_k(\eta)|^2 \quad (81)$$

For $\phi = a\delta_\varphi$, the power spectrum of δ_φ is given by

$$\mathcal{P}_{\delta_\varphi}(k) = \frac{k^3}{2\pi^2} \left| \frac{\phi_k(\eta)}{a(\eta)} \right|^2 \quad (82)$$

Using Eqs. (45) and (46), we find following power spectrum:

$$\mathcal{P}_{\delta_\varphi}(k) = \frac{k^3}{2\pi^2} \frac{H^2}{2k^3} |k\eta - i|^2 \quad (83)$$

For $|k\eta| \gg 1$, this result is consistent with Eq.(46). For $|k\eta| \ll 1$, the fluctuations are outside the horizon and are given by

$$|\phi_k(\eta)|^2 = \frac{H^2}{2k^3} \quad (84)$$

Therefore, the power spectrum of the inflation fluctuation is constant and can be written by following relation:

$$\mathcal{P}_{\delta_\varphi}(k) = \left(\frac{H_k}{2\pi} \right)^2 \quad (85)$$

Note that since H varies slowly during inflation, H_k and $\mathcal{P}_{\delta_\varphi}(k)$ weakly depend on k . This result means that a light scalar field in a quasi-de Sitter space time acquires an almost scale invariant spectrum of the fluctuation with amplitude given in the above equation.

Let us consider now the power spectrum for the field A ,which is governed by Eq.(67) or (68). According to Ref.[10], we can write general solution in terms of Bessel functions as follows:

$$\mathcal{A}(\eta, k) = (k\eta)^{\frac{1}{2}} \times \left[C_1(k) J_{\gamma - \frac{1}{2}}(k\eta) + C_2(k) J_{-\gamma + \frac{1}{2}}(k\eta) \right] \quad (86)$$

Where $C_1(k)$ and $C_2(k)$ are two scale-dependent coefficients which are fixed by initial conditions in the ultraviolet limit. For $-k\eta \Rightarrow \infty$, we have [2]

$$\mathcal{A}(\eta, k) \to \frac{1}{\sqrt{2k}} e^{-ik\eta} \quad (87)$$

The normalization condition for time dependent amplitude $A(t,k)$ is given by

$$A(t,k)\dot{A}^*(t,k) - \dot{A}(t,k)A^*(t,k) = \frac{i}{f^2 a^3} \quad (88)$$

Since $\dot{A} = \frac{A}{a}$, the coefficients C_1 and C_2 are given by

$$C_1(k) = -C_2(k) e^{i\pi\left(\gamma - \frac{1}{2}\right)}, C_2(k) = \sqrt{\frac{\pi}{4k}} \frac{e^{\frac{-i\pi(\gamma+1)}{2}}}{\cos(\pi\gamma)} \quad (89)$$

Using the asymptotic behaviour of Bessel functions for $-k\eta \to 0$, we obtain [2]

$$\mathcal{A}(\eta, k) \to \frac{\sqrt{\pi}}{2^{\gamma + \frac{1}{2}}} \frac{e^{\frac{i\pi\gamma}{2}}}{\Gamma\left(\gamma + \frac{1}{2}\right) \cos(\pi\gamma)} k^{-\frac{1}{2}} (k\eta)^\gamma + \frac{\sqrt{\pi}}{2^{-\gamma + \frac{3}{2}}} \frac{e^{\frac{i\pi(1-\gamma)}{2}}}{\Gamma\left(-\gamma + \frac{3}{2}\right) \cos[\pi(1-\gamma)]} k^{-\frac{1}{2}} (k\eta)^{1-\gamma} \quad (90)$$

Where the symmetry of the two terms with respect to the exchange $\gamma \to 1 - \gamma$ is obvious. We define dimensionless function $\mathcal{F}(\delta)$ by the following expression [2]

$$\mathcal{F}(\delta) = \frac{\pi}{2^{2\delta+1} \Gamma^2\left(\delta + \frac{1}{2}\right) \cos^2(\delta\pi)} \quad (91)$$

With $\delta = \gamma$ if $\gamma \le \frac{1}{2}$ and $\delta = 1 - \gamma$ if $\gamma \ge \frac{1}{2}$. We compute the power spectrum in the case where the scale factor is given by a power law of the conformal time. We have the following relation [2,44]

$$a(\eta) = a_0 \left| \frac{\eta}{\eta_0} \right| \quad (92)$$

The case $\beta = 2$ corresponds to de Sitter space–time. One can also show that the spectral index of density perturbations is given by $n_s = 2\beta + 5$ [45]. If we adopt a very conservative bound $|n_s - 1| \lesssim 0.1$, then this amounts to choosing the index β such that $-2.05 \lesssim \beta < -2$.Notice that the above assumption for the scale factor is not as restrictive as it may seem at the first sight. Indeed, the above law is also valid in the slow-roll approximation where one has [45]

$$a(\eta) \propto |\eta|^{-1-\epsilon} \quad (93)$$

Where ϵ is the first slow-roll parameter which is constant at the first order (see Eqs.(35) and (36)). Therefore, our ansatz allows us to treat the case of slow-roll inflation like, for instance, large and small field inflation or even hybrid inflation in the inflationary valley. The inflation period in conformal time lays in the interval, $\infty < \eta < 0$. In this section, we adopt as in Ref.[12] the power law form of the coupling function. We have

$$f(\eta) \propto a^\alpha \quad (94)$$

where α is the free index. The coupling function $f \propto a^2$ belongs to a class of models with interesting scenarios. It will be showed below that ansatz (94) leads to a power law for the spectrum of the magnetic field with the tilt n_B determined by the value of the parameter α ($n_B = 0$ for $\alpha = 2$). We can write $\frac{f''}{f}$ in Eq.(68) as follows:

$$\frac{f''}{f} = \frac{\gamma(\gamma-1)}{\eta^2} \tag{95}$$

Where $\gamma = \alpha(1+\beta)$.Thus, the power spectrum of generated magnetic field is given by

$$\frac{d\rho_B(\eta,k)}{dk} = \frac{k^3}{2\pi^2}\mathcal{F}(n)\frac{1}{a^4}\left(\frac{k}{aH}\right)^{2n} \tag{96}$$

Where $n = \gamma$ if $\gamma \leq \frac{1}{2}$ and $n = 1-\gamma$ if $\geq \frac{1}{2}$.

4. Coupling function

In this section, we derive the general relation between the coupling function $f(\phi)$ and the form of inflationary potential $V(\phi)$. Setting, for simplicity, the reduced Planck mass $M_p^2 = \frac{\hbar c}{8\pi G} = 1$, we obtain

$$H^2 \simeq \frac{1}{3}V(\phi)\,, \frac{d\phi}{dt} \simeq -\frac{1}{3H}\frac{dV}{d\phi} \tag{97}$$

This gives

$$\frac{da}{a} = -V(\phi)\left(\frac{dV}{d\phi}\right)^{-1} d\phi \tag{98}$$

This leads to

$$a = e^{-\int \frac{V(\phi)}{V_{,\phi}} d\phi} \tag{99}$$

Therefore, the coupling function in the slow-roll regime is expressed [2] through the scalar field potential as follows:

$$f(\phi) \propto exp\left[-\alpha \int \frac{V(\phi)}{V(\phi)_{,\phi}} d\phi\right] \tag{100}$$

Let us consider now some examples. For the large field model with potential

$$V(\phi) = M^4\phi^p \tag{101}$$

We obtain

$$f(\phi) \propto exp\left(-\frac{\alpha}{2p}\phi^2\right) \tag{102}$$

The scalar field potential in the cases of small field and hybrid inflation equals

$$V(\phi) = M^4(1 \pm \lambda\phi^p) \tag{103}$$

Where minus and plus sign corresponds to the small field and hybrid inflation. For such a potential, we have following coupling function:

$$f(\phi) \propto exp\left[\mp \frac{\alpha\phi^{2-p}}{\lambda p(2-p)} - \frac{\alpha\phi^2}{2p}\right] \tag{104}$$

And

$$f(\phi) \propto \phi^{\mp\frac{\alpha}{2\lambda}} e^{-\frac{\alpha\phi^2}{4}} \tag{105}$$

In the case $p = 2$.

5. The evolution of magnetic field during preheating

In this section we consider the evolution of magnetic fields during preheating following mostly Refs.[15,40]. Let us remind what is preheating. During inflation radiation and matter are red shifted away and as a result temperature drops rapidly to very low values. All the energy density is stored in the inflation field. This energy should be converted into particles and radiation for the Universe starts its normal Big-Bang evolution at the end of inflation. Once the slow-roll condition breaks down, the evolution of inflation begins to accelerate and it reaches the minimum value of the potential, where it starts to oscillate around the minimum. Then the coupling of the inflation to other fields becomes important leading to an explosive particle production for a certain wave number of matter fields. This process is known as the parametric response. It leads to the fast and efficient transfer of energy from the inflation to matter fields. As a result, the energy density in matter and radiation rapidly becomes similar to the energy density of inflation at the end of inflation. This leads to significantly higher reheating temperature and also to a non-thermal distribution of the energy. This process is known in the literature as preheating. During preheating the inflation potential can be approximated by a parabola. Then the inflation field evolves in time as

$$\phi(t) \simeq \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{3}mt}\sin(mt). \tag{106}$$

Then we obtain the following equation for the amplitude $A(t,k)$:

$$\ddot{A}(t,k) + \left(3H + 2\frac{\dot{f}}{f}\right)\dot{A}(t,k) + \left(\frac{k^2}{a^2} + H^2 + 2H\frac{\dot{f}}{f} + \frac{\ddot{a}}{a}\right)A(t,k) = 0 \tag{107}$$

For $A(t,k) = \mathcal{N}(t,k)a^{-\frac{3}{2}}f^{-1}(t)$, we obtain

$$\ddot{\mathcal{N}}(t,k) + \left(\frac{k^2}{a^2} - \frac{\ddot{f}}{f} + \frac{1}{4}H^2 - H\frac{\dot{f}}{f} + \frac{1}{2}\frac{\ddot{a}}{a}\right)\mathcal{N}(t,k) = 0 \tag{108}$$

In order to proceed, we should know the shape of the coupling function (ϕ) . Using Eqs.(102) and (106), we find

$$f(\phi) \propto exp\left[-\frac{4\alpha}{3p(mt)^2}\sin^2(mt)\right] \tag{109}$$

Then Eq.(108) can be written approximately as

$$\ddot{\mathcal{N}}(t,k) + \left(\frac{k^2}{a^2} + \frac{1}{4}H^2 + \frac{8\alpha}{3pt^2}\cos(2mt)\right)\mathcal{N}(t,k) = 0 \quad (110)$$

This is the Mathie equation [2]

$$\frac{d^2\mathcal{N}}{dz^2} + \left(\frac{k^2}{a^2m^2} + \frac{H^2}{4m^2} - \frac{8\alpha}{3p\left(z+\frac{p}{2}\right)^2}\cos(2z)\right)\mathcal{N} = 0 \quad (111)$$

With

$$z = mt - \frac{\pi}{2},\ a_M = \frac{k^2}{a^2m^2} + \frac{H^2}{4m^2},\ q_M = \frac{4\alpha}{3p\left(z+\frac{p}{2}\right)^2} \quad (112)$$

Since we are interested in long wavelength modes so that $H \ll m$ and, consequently, $a_M \ll 1$, the Mathieu equation has instability only for $q_M \gtrsim 1$. Since both α and p are constants of order unity with typical values $\alpha = p = 2$, we conclude that the instability continues for less than one period of the field oscillation. Therefore, the parametric resonance is negligible and one cannot expect any enhancement of the magnetic field during preheating, at least with the coupling functions considered in this article. A last comment is in order here. The present analysis is valid only if one approximates the potential by a parabola. Clearly, in more complicated situations, like, for instance, the hybrid inflation where the reheating takes place in a two-dimensional field space proceeds in more complicated way. One could also expect that the coupling between the inflation and the gauge field will affect reheating. However, since this coupling is generally suppressed by some power of the Planck mass, this effect should be limited.

A. Starobinsky potential

As an example of the evolution of magnetic fields during preheating, we consider [40] in this subsection the case of the Starobinsky model with the effective inflation potential

$$V(\phi) = \frac{3\mu^2}{4}\left(1 - exp\left[-\sqrt{\frac{2}{3}}\phi\right]\right)^2 \quad (113)$$

Where $\mu = 1.3 \times 10^{-5} M_p$ [46].Using the slow-roll equations (97), we obtain

$$a(t) = exp\left(\frac{\mu t}{2}\right)\left[1 - \frac{t}{t_{inf}}\right]^{\frac{3}{4}} \quad (114)$$

$$\phi(t) = \phi_i + \sqrt{\frac{3}{2}}\ln\left[1 - \frac{t}{t_{inf}}\right] \quad (115)$$

Where $t_{inf} \simeq \frac{3}{2\mu}e^{\sqrt{\frac{2}{3}}\phi_i}$ is the duration of inflation. Eq.(67) for $\mathcal{F}(t,k) = a^{\frac{1}{2}}A(t,k)$ implies

$$\ddot{\mathcal{F}}(t,k) + \omega_k^2(t)\mathcal{F}(t,k) = 0$$
$$,\omega_k^2(t) = \frac{k^2}{a^2} - \frac{\ddot{f}}{f} + \frac{1}{4}H^2 - H\frac{\dot{f}}{f} - \frac{1}{2}\frac{\ddot{a}}{a} \quad (116)$$

For the Ratra coupling function [34] $(\phi) = exp(\alpha\phi)$, we have

$$\omega_k^2(t) = \frac{k^2}{a^2(t)} - H\alpha\dot{\phi} - \alpha^2\dot{\phi}^2 - \alpha\ddot{\phi} - \frac{1}{4}H^2 - \frac{1}{2}\dot{H} \quad (117)$$

Using Eqs.(114) and (115), we find [40]

$$-H\alpha\dot{\phi} \simeq \frac{\sqrt{6}}{4}\frac{\mu^2\alpha}{(\mu t_{inf} - \mu t)} > 0,$$
$$-\alpha^2\dot{\phi}^2 \simeq -\frac{3}{2}\frac{\mu^2\alpha^2}{(\mu t_{inf} - \mu t)^2} < 0$$
$$-\alpha\ddot{\phi} \simeq \frac{\sqrt{6}}{2}\frac{\mu^2\alpha}{(\mu t_{inf} - \mu t)^2} > 0,\quad H^2 \lesssim \frac{\mu^2}{4},$$
$$\dot{H} \simeq -\frac{3}{4}\frac{\mu^2}{(\mu t_{inf} - \mu t)^2}$$

To estimate these terms we take into account that $\mu t_{inf} \simeq \frac{3}{2}e^{\sqrt{\frac{2}{3}}\phi_i} \approx 130 \gg 1$ for the inflation initial value $\phi_i = 5.5$ (for more details, see Ref.[40]).

6. The magnetic field after inflation

After inflation and preheating, the universe contains plasma of charged particles. Its electric conductivity σ_c is then quite large and electric current j^μ is given by [43]

(118)

Where ρ_e is the charge density. Using $E_\mu = U^\nu F_{\mu\nu}$ and $U^\mu = (1, \vec{0})$, we find in the Coulomb gauge

$$A_\nu'' + a\sigma_c f A_\nu' - a^2\partial_i\partial^i A_\nu = 0 \quad (119)$$

Therefore, the Fourier amplitude, $A(t,k)$ obeys the following equation:

$$A''(t,k) + \left(a\sigma_c + 2\frac{\acute{a}}{a}\right)A'(t,k)$$
$$+\left(\frac{k^2}{a} + \acute{a}\sigma_c + \frac{a''}{a}\right)A(t,k) = 0 \quad (120)$$

In large scale limit we have, $\sigma_c \gg H$. Then solution to the Eq.(120) can be written as

$$A_\nu(t,\vec{x}) = \frac{D_{1i}(\vec{x})}{\sigma_c}e^{-\sigma_c t} + D_{2i}(\vec{x}) \quad (121)$$

We can ignore the exponential term because its characteristic time is given by, $\tau = \sigma_c^{-1} \gg \frac{1}{H}$. Therefore, $A_\nu(t,\vec{x}) \simeq D_{2i}(\vec{x})$. This means that electric field is zero and magnetic field does not evolve in time. The energy density of the magnetic field

$$\rho_\beta(\eta) = \frac{1}{2\pi^2}\frac{1}{a^4}\int_0^{+\infty} dk\, k^3 \qquad (122)$$

diverges at large k and scales as $\frac{1}{a^4}$. In fact, the present magnetic energy at a given scale L is given by

$$\rho_\beta(\eta) = \frac{d\rho_\beta}{dk}\left(z = z_{end}, k = \frac{2\pi}{L}\right)\frac{2\pi}{L}\left(\frac{a_{end}}{a_0}\right)^4 \qquad (123)$$

Using the expression of ρ_β at the end of inflation, we obtain [9]

$$\frac{d\Omega_\beta}{d\ln k} = \frac{32}{9}\mathcal{F}(n)\left(\frac{\rho_{cri}}{M_{pl}^4}\right)\left(\frac{\rho_{cri}}{\rho_{end}}\right)^n\left(\frac{a_0}{a_{end}}\right)^{2n}\left(\frac{k}{a_0 H_0}\right)^{2n+4} \qquad (124)$$

Where, $\Omega_\beta(k) = \frac{\rho_\beta(z=0,k)}{\rho_{cri}}$. The ratio $\frac{a_0}{a_{end}}$ depends on the history of the Universe and, in particular, on the process of reheating. According to Refs.[2]and [47,48]),

$$\frac{a_0}{a_{end}} = \frac{1}{R}\rho_{end}^{\frac{1}{2}}\left(\Omega_{rad}^0\right)^{-\frac{1}{4}}(3H_0^2)^{-\frac{1}{4}} \qquad (125)$$

7. Axion potential

The hypothesis of an invisible axion was put forwarded approximately forty years ago. It turned out to be an unusually fruitful idea crossing boundaries between particle physics, astrophysics, and cosmology [52]. It was proposed to solve the strong CP problem connected with the θ term in the action density of the Standard Model [52]. This axion hypothesis is now being used in many models of inflationary cosmology and dark matter. One of the plausible candidates for a dark matter particle is axion.

A. Axion N-flation potential

The axion N-flation model is based on a set on N_f uncoupled fields ϕ_i with the potential

$$V_i = \Lambda_i^4\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi\phi_i}{f_i}\right)\right) \qquad (126)$$

Where f_i is the i^{th} axion decay constant. If a single field is present, this model is known as the natural inflation [51, 53].For the N-flation with N_f fields, the Friedman equation is given by

$$H^2 = \frac{1}{3}\sum_i^{N_f}\left(\frac{1}{2}\dot{\phi}_i^{\,2} + V_i(\phi_i)\right) \qquad (127)$$

And the scalar fields evolve according to the equation

$$(128)$$

Where, $V_{i,\phi_i} = \partial V_i/\partial\phi_i$. In the slow-roll regime, we have

$$3H^2 \approx \sum_i^{N_f} V_i(\phi_i) = V\ , 3H\dot{\phi}_i \approx -V_{i,\phi_i} \qquad (129)$$

It is convenient to define the slow-roll parameter for each field

$$\epsilon_i = \frac{1}{2}\left(\frac{V_{i,\phi_i}}{V_i}\right)^2 \qquad (130)$$

Differentiating Eq.(129) we find

$$\dot{H} = -\frac{1}{6}\frac{\sum_i^{N_f} V_{i,\phi_i}^2}{V} \qquad (131)$$

The number of e-folds is given by

$$N = \sum_i^{N_f}\int_{\phi_{i,end}}^{\phi_i}\frac{V_i}{V_{i,\phi_i}}d\phi_i \qquad (132)$$

Using the δN formalism, we obtain that the power spectrum of scalar perturbations equals[50]

$$p_\zeta = \frac{H_*^{\,2}}{4\pi^2}\sum_i N_i N_i\ , N_i = \frac{V_i}{V_{i,\phi_i}} \qquad (133)$$

By using Eq.(130), we obtain

$$\epsilon_i = \frac{2\pi^2}{f_i^{\,2}}\left(\frac{1+\cos\left(\frac{2\pi\phi_i}{f_i}\right)}{1-\cos\left(\frac{2\pi\phi_i}{f_i}\right)}\right) \qquad (134)$$

Combining ϵ_i and plugging them into p_ζ , we finally find the following power spectrum:

$$p_\zeta = \frac{H_*^{\,2}}{8\pi^2}\sum_i\frac{1}{\epsilon_i^*} \qquad (135)$$

Where $*$ means that the corresponding quantity is evaluated at the horizon crossing.The spectral index is defined by

$$n - 1 = \frac{d\ln p_\zeta}{d\ln k} = \frac{1}{H_*}\frac{d\ln p_\zeta}{dt}$$
$$= -2\epsilon_H^* - \frac{8\pi^2}{3H_*^{\,2}}\sum_i\frac{\Lambda_j^4}{f_j^{\,2}}\frac{1}{\epsilon_j^*}\Big/\sum_i\frac{1}{\epsilon_i^*} \qquad (136)$$

Where

$\epsilon_H = \sum_i\left(\frac{V_i}{V}\right)^2\epsilon_i$ is the global slow-roll parameter which should be smaller than the unity $\epsilon_H < 1$ during inflation. The tensor power spectrum is defined similarly to the scalar case. Therefore, the power spectrum is given by

$$p_T \approx \frac{8}{1}\left(\frac{H}{2\pi}\right)^2_{k=aH} = \frac{2}{3}\frac{V_*}{\pi^2} \quad (137)$$

Where we set $M_{pl} = \frac{\hbar c}{8\pi G}$ =1. Thus, the tensor to scalar ratio equals

$$r = \frac{p_T}{p_\zeta} = 16 \Big/ \sum_i \frac{1}{\epsilon_i^*} \quad (138)$$

The denominator in the equation above can be estimated as $\sum_i \frac{1}{\epsilon_i^*} \approx \frac{\bar{N}}{\bar{\epsilon}}$, where $\bar{N}$ is the number of axion fields at the hilltop. Since the slow-roll parameters ϵ_i approach zero for the values of fields close to the hilltop, the sum in Eqs.(135) and (138) is dominated by the smallest ϵ_i. If $\bar{N}$ fields have roughly comparable ϵ_i of order $\bar{\epsilon}$ which is related $\bar{\alpha}$ by the following relation (see, Eq.134):

$$\bar{\epsilon} = \frac{2\pi^2}{f^2}\left[\frac{1+cos(\bar{\alpha})}{1-cos(\bar{\alpha})}\right] = \frac{2\pi^2}{f^2}\left[\frac{1+cos(\bar{\alpha})}{1+\left[1-\left(\frac{\pi-\bar{\alpha}}{2}\right)^2\right]}\right] \quad (139)$$

where $\bar{\alpha} = \frac{2\pi\bar{\phi}}{f}$.Note that around the hilltop $(\pi - \bar{\alpha}) \ll 1$ and, therefore, $\sum_i \frac{1}{\epsilon_i^*} \approx \frac{\bar{N}}{\bar{\epsilon}}$ in our approximation. Thus, we find

$$\bar{\epsilon} \approx \frac{\pi^2}{f^2}(1 - \cos(\pi - \bar{\alpha})) \approx \frac{\pi^2}{2f^2}(\pi - \bar{\alpha})^2 \quad (140)$$

Plugging the above equation into Eq.135, we obtain

$$p_\zeta =\approx \frac{H_*^2}{8\pi^2}\frac{\bar{N}}{\bar{\epsilon}} \approx \frac{H_*{}^2\bar{N}f^2}{4\pi^4(\pi - \bar{\alpha})^2} \quad (141)$$

Thus, the tensor to scalar ratio is given by

$$r = \frac{p_T}{p_\zeta} \approx \frac{8\pi^2(\pi-\bar{\alpha})^2}{\bar{N}f^2} \quad (142)$$

Requiring that $\bar{\phi} = \frac{f\bar{\alpha}}{2\pi}$ is not less than the quantum fluctuation $\frac{H}{2\pi}$,we need

$$\phi_{hiltop} - \bar{\phi} \approx H/2\pi\,, \phi_{hiltop} - \bar{\phi} \gtrsim H/2\pi \quad (143)$$

Then we obtain

$$\frac{f}{2} - \frac{f\bar{\alpha}}{2\pi} \gtrsim \frac{H}{2\pi} \rightarrow (\pi - \bar{\alpha}) \gtrsim \frac{H}{f} \quad (144)$$

Note that, $\phi_{hiltop} = \frac{f}{2}$. Using the above relation and p_ζ,we find

$$(\pi - \bar{\alpha}) \approx \frac{H\sqrt{\bar{N}}f}{2\pi^2\sqrt{p_\zeta}} \quad (145)$$

Finally, we have

$$\sqrt{\bar{N}}f^2 \gtrsim 2\pi^2\sqrt{p_\zeta} \quad (146)$$

The WMAP and Planck 2015 observations require $p_\zeta = 2 \times 10^{-9}$ [3].Therefore,

$$\sqrt{\bar{N}} \lesssim \frac{1.86 \times 10^4}{f_{nl}} \quad (147)$$

Where $f_{nl} \approx \frac{5}{6}\frac{2\pi^2}{\bar{N}}\left(\frac{M_{pl}}{f}\right)^2$, is the non-Gaussianity parameter [50].

The above discussion demonstrates that one can replace axions with a single field quadratic term or using $\bar{N}$ with the potential

$$V(\phi) = \bar{N}\Lambda^4\left[1 - cos\left(\frac{2\pi\phi}{\sqrt{\bar{N}}f}\right)\right] \quad (148)$$

In this case one can compute the power spectrum of generated magnetic fields and its spectral index.

B. Quadratic plus one axion model

The model is with one scalar field with the quadratic potential and one axion field

$$W = \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \Lambda^4\left(1 - \cos\frac{2\pi x}{f}\right) \quad (149)$$

is considered in Ref.[54]. The equations for the background fields read

$$\ddot{\phi} + 3H\dot{\phi} + U_{,\phi} = 0, \quad \ddot{x} + 3H\dot{x} + V_{,x} = 0 \quad (150)$$

The unperturbed Friedman equations are given by

$$H^2 = \frac{1}{3}\left(\frac{1}{2}\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}\dot{x}^2 + W\right), \dot{H} = -\frac{1}{2}(\dot{\phi}^2 + \dot{x}^2)$$

Where we set M_{pl}=1. In the slow-roll regime, the field equations reduce to

$$3H\dot{\phi} \approx -U_{,\phi}, \quad 3H\dot{x} \approx -V_{,x}, \quad 3H^2 \approx W \quad (152)$$

with the slow-roll parameters

$$\epsilon_\phi = \frac{M_{pl}^2}{2}\left(\frac{U_{,\phi}}{U}\right)^2, \epsilon_x = \frac{M_{pl}^2}{2}\left(\frac{V_{,x}}{V}\right)^2 \quad (153)$$

The number of e-folds is defined by

$$N = \int_{\phi_{end}}^{\phi_{exit}} \frac{U}{U_{,\phi}}d\phi + \int_{x_{end}}^{x_{exit}} \frac{V}{V_{,x}}dx \quad (154)$$

Where ϕ_{exit} and x_{exit} are the values of scalar fields at the horizon crossing. For $U = \frac{1}{2}m^2\phi^2$ and $V = \Lambda^4\left(1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)\right)$, we obtain

$$\epsilon_\phi = \frac{2}{\phi^2}, \quad \epsilon_x = \frac{2\pi^2}{f^2}\left[\frac{1+cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}{1-cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}\right] \quad (155)$$

Further,

$$N_\phi = \frac{\partial N}{\partial \phi} = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_\phi}}, N_x = \frac{\partial N}{\partial x} = \frac{f}{2\pi}\left[\frac{1-cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}{sin\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}\right] = \frac{1}{\sqrt{2\epsilon_x}} \tag{156}$$

And the power spectrum equals

$$p_\zeta = \frac{H_*{}^2}{8\pi^2}\left[\frac{1}{\epsilon_x} + \frac{1}{\epsilon_\phi}\right] \tag{157}$$

Where $*$ means that the corresponding quantities are evaluated at the horizon crossing. In the slow-roll regime, we

$$p_\zeta = \frac{W_*}{24\pi^2}\left[\frac{1}{\epsilon_x} + \frac{1}{\epsilon_\phi}\right] \tag{158}$$

We define the spectral index of the primordial power spectrum as $n-1 = \frac{d\ln p_\zeta}{d\ln k}$. We find

$$n-1 = -2\epsilon_H - \frac{1}{3H_*{}^2}\left[\frac{\frac{2m^2}{\epsilon_\phi} + \frac{8\pi^2\Lambda^4}{f^2}\frac{1}{\epsilon_x}}{\frac{1}{\epsilon_\phi} + \frac{1}{\epsilon_x}}\right] \tag{159}$$

And the tensor to scalar ratio $r = \frac{p_T}{p_\zeta}$ is given by

$$r = \frac{p_T}{p_\zeta} = \frac{16}{\frac{1}{\epsilon_\phi} + \frac{1}{\epsilon_x}} \tag{160}$$

By using Eq.(154), we rewrite the number of e-folds in the following form:

$$N \approx \frac{1}{4}\left[\phi_*{}^2 - \phi_{end}^2\right] + \frac{f^2}{4\pi^2}\ln\left(\frac{2}{1+\cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}\right) \tag{161}$$

The global slow-roll parameter together with the condition $\epsilon_\phi = 1$for the end of inflation gives $\phi_{end}^2 = 2$.Therefore we have

$$N \approx \frac{1}{4}\left[\phi_*{}^2 - 2\right] + \frac{f^2}{4\pi^2}\ln\left(\frac{2}{1+\cos\left(\frac{2\pi x}{f}\right)}\right) \tag{162}$$

C. Single axion field

Now we investigate the form of coupling function in the single axion field model. The coupling function satisfies Eq.(100).Therefore By using Eq.(148) with the axion decay constant $\acute{f} = \sqrt{N}f$, we can find the coupling function**.** The inflation potential is given by

$$V(\phi) = \Lambda^4\left(1 - \cos\left(\frac{\phi}{f}\right)\right) \tag{163}$$

And is plotted in Fig. 1. The coupling function equals

$$f(\phi) = \cos^{(\alpha\beta)}\left(\frac{\phi}{2f}\right) \tag{164}$$

Eqs.(97) and (98) make possible to determine the scale factor a and the inflation field ϕ as a function of time

$$a(t) = C_0\cos^\beta\left(\frac{\phi}{2f}\right) \tag{165}$$

Where $C_0 = \frac{a_i}{\cos(\beta)\left(\frac{\phi_i}{2f}\right)}, \beta = 2f^2$, and $a_i = 1$ is value of the scale factor in the beginning of inflation. The inflation field ϕ is determined by following relation

$$\sec\left(\frac{\phi}{2f}\right) + \tan\left(\frac{\phi}{2f}\right) = \left[\sec\left(\frac{\phi_i}{2f}\right) + \tan\left(\frac{\phi_i}{2f}\right)\right]e^{\left(-\sqrt{\frac{2\Lambda^2}{32f^2}}t\right)} \tag{166}$$

Combining Eqs.(165), (164), and (67), we can find the power spectrum of magnetic fields during inflation. The number of e-folds is given by

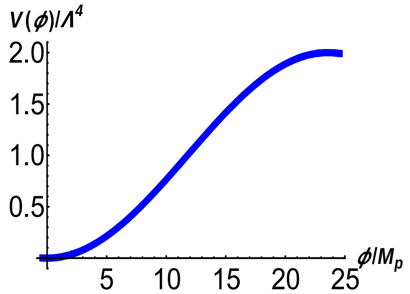


Fig. 1. The inflation potential (163) in the natural inflation model for the decay constant $f = 7.5M_p$.

$$N = f^2 \times \left(\ln\left[1+\tan^2\left(\frac{\phi_i}{2f}\right)\right] - \ln\left[1 + tan^2\left(\frac{\phi_{end}}{2f}\right)\right]\right) = \beta\ln\frac{\cos(\phi_{end}/2f)}{\cos(\phi_i/2f)} \tag{167}$$

Inflation ends when $\epsilon = 1$. Using Eqs.(36), (130), and (153), we obtain

$$\epsilon = 1 = \frac{1}{2f^2}\left[\frac{1 + cos\left(\frac{\phi_{end}}{f}\right)}{1 - cos\left(\frac{\phi_{end}}{f}\right)}\right] \tag{168}$$

That gives

$$\phi_{end} = f\cos^{-1}\left(\frac{1-\beta^{-1}}{1+\beta^{-1}}\right) \qquad (169)$$

Where $\beta = 2f^2$.We have also

$$\phi(N) = 2f\cos^{-1}\left(e^{-N/\beta}\sqrt{\frac{\beta}{\beta+1}}\right) \qquad (170)$$

The total duration of inflation defines the initial value of the inflation $\phi_i = \phi(N_{tot})$. The value of the axion decay constant is constrained by the observed scalar spectral index and tensor-to-scalar ratio [3, 56, 57] and typically lie in the range

$$3 \lesssim \frac{f}{M_p} \lesssim 10. \qquad (171)$$

The value of Λ can be fixed by the requirement that the amplitude of primordial scalar excitations at $\Delta N = 50-60$ e-folds before the end of inflation (when physically relevant modes cross the horizon) is equal to[3]

$$p_\zeta = \left(\frac{H^2}{2\pi|\dot{\phi}|}\right)|_{\Delta N} = 2.2\times10^{-9} \qquad (172)$$

Using Eqs. (97) and (170), we find

$$p_\zeta = \sqrt{\frac{2}{3}\frac{f\Lambda^2}{2\pi}\frac{\sin^2(\phi/2f)}{\cos(\phi/2f)}}\,|_{\Delta N} = 2.2\times10^{-9} \qquad (173)$$

For $\Delta N = 50-60$ and f in range (171), we can determine the value of Λ. Without loss of generality, we can choose the initial moment of time to be at $N_{tot} = \Delta N$ e-folds before the end of inflation because only after this time the physically relevant modes start crossing the horizon. Therefore, we define ,$\phi_i = \phi(\Delta N)$. For example, if we choose $\Delta N = 60$ and $f = 7.5M_p$,we obtain $\phi_i = 14.2M_p$ and $\Lambda = 5.9\cdot10^{-3}M_p = 1.41\cdot10^{16}Gev$. One can numerically solve the system of background equations (25) and (28). Then the corresponding time dependence of the inflation field, scale factor, Hubble parameter, and slow-roll parameters are shown in Fig. 2. Approximate solutions (165) and (166) nicely fit the accurate numerical solutions during inflation stage and are shown in Fig. 3.
By making use of Eqs.(164), (67), and (73), we find

$$\frac{d\rho_B}{d\ln k} = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{k}{a(t)}\right)^4 k|\mathcal{A}(t,k)|^2 \qquad (174)$$

During inflation, we should have $f(\phi) = \cos^{(\alpha\beta)}\left(\frac{\phi}{2f}\right) < 1$ in order to avoid the

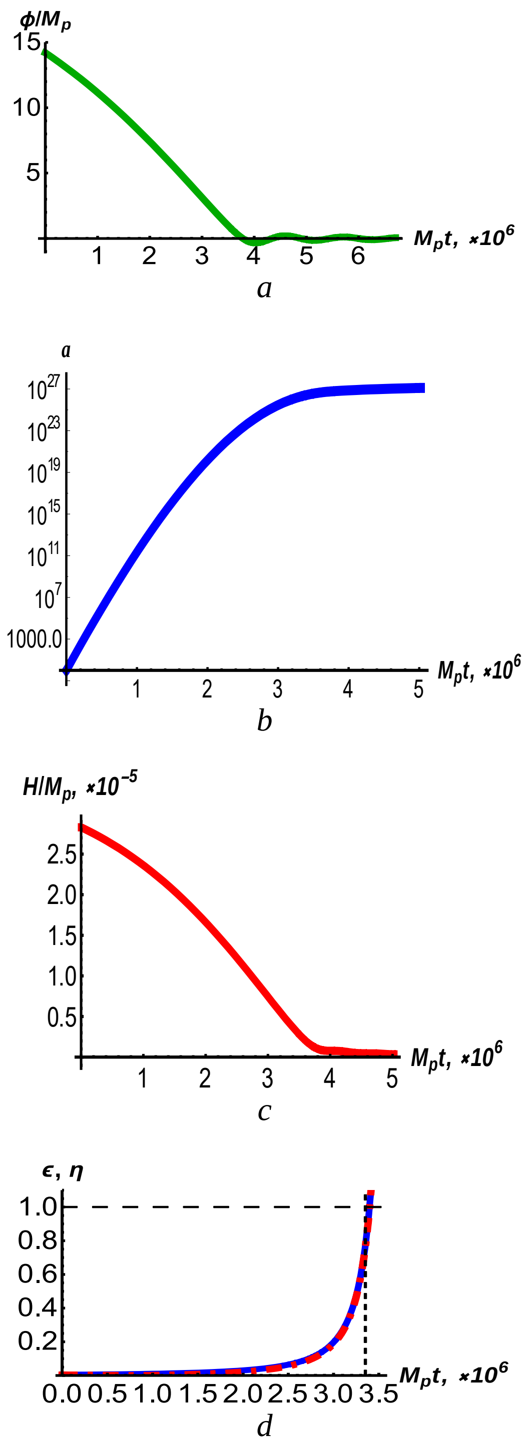


Fig. 2. Time dependencies of the inflation field (*a*), scale factor (*b*), Hubble parameter (*c*) and slow-roll parameters ϵ and η (*d*). The used axion decay constant $f = 7.5M_p$, corresponds to $\Lambda = 1.4\times10^{16}$Gev.

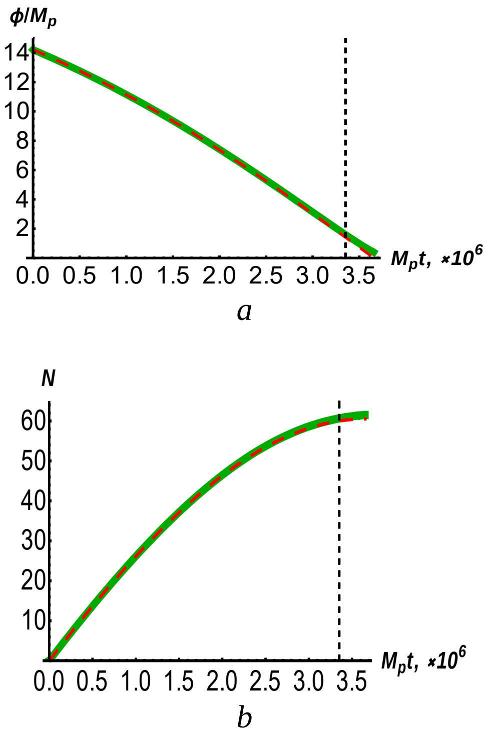


Fig. 3. Time dependencies of the inflation field and scale factor (number of e-folds) obtained from numerical integration of the system of Friedmann and KGF equations (solid lines *a*, *b*) and approximate analytical solutions (165) and (166) derived in a slow-roll approximation. Vertical dashed line shows the moment of the end of inflation when $\epsilon = 1$.

strong coupling problem. For this, we should consider only negative powers, α.

The square modulus of the mode function and magnetic power spectrum in the end of inflationary stage are shown in Fig. 4 for different negative values of parameter $\alpha = -1.5, -2.0, -2.5, -3.0$. The power spectrum behaves like

$$\frac{d\rho_B}{d\ln k} \sim k^{(6+2\alpha)} \quad for\ \alpha < -1 \qquad (175)$$

It is in a nice agreement with Eq. (39) in Ref. [2], because the coupling function (164) behaves like $\sim a^{\alpha}$ during inflation stage. Therefore, the power spectrum could be treated analytically, assuming de Sitter expansion with $H \simeq const$ during inflation, similarly to Ref. [2].

A few words should be said about the behavior of the power spectrum. The modes with $k < k_i \sim a_i H_i \sim 3.0 \times 10^{-5} M_p$ are outside the horizon even at the beginning of the inflation. They exit the horizon earlier than $50 - 60$ e-folds before the end of inflation, therefore they are physically irrelevant. The modes with $k > k_e \sim a_e H_e \sim e^{N_e} k_i \sim 10^{21} M_p$ are inside the horizon even at the end of inflation. They oscillate in time during the inflation stage and do not undergo amplification. The modes with intermediate momenta $k_i < k < k_e$ are physically relevant. They cross the horizon during inflation and change their regime from the oscillatory behavior without changing the amplitude (inside the horizon) to a monotonic behavior with significant enhancement (outside the horizon). These modes determine the power spectrum of generated electromagnetic fields. In order to estimate and analytically analyze the back reaction problem, we need to find the electric power spectrum. According to Refs.[2, 40], we have

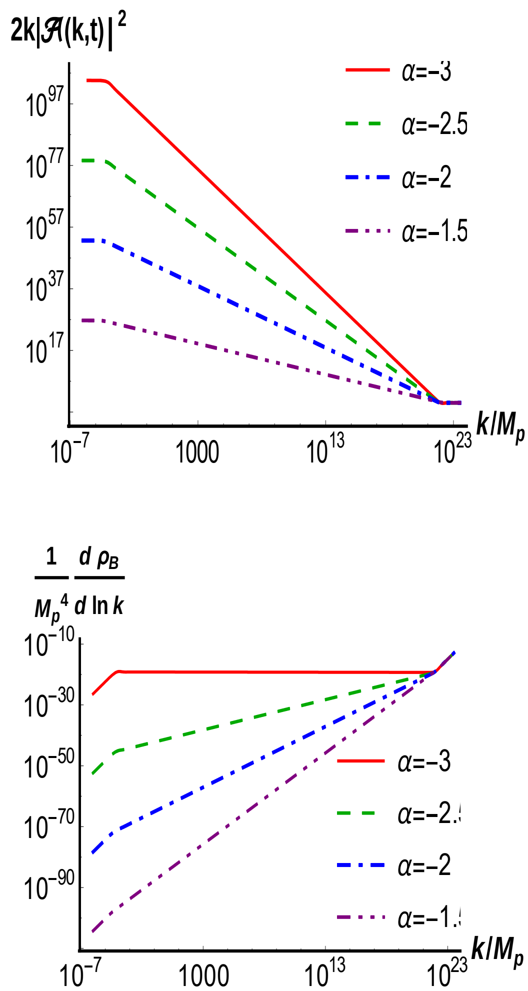


Fig. 4. Square modulus of the mode function and magnetic power spectrum at the end of inflationary stage for different values of α.

$$\rho_E(t)=\int_0^{+\infty}\frac{dk}{k}\frac{d\rho_E(t,k)}{d\ln k}=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^{+\infty}\frac{dk}{k}\left(\frac{k}{a(t)}\right)^2 kf^2(t)\left|\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\mathcal{A}(t,k)}{f(t)}\right)\right|^2 \quad (176)$$

Therefore, the power spectrum of electric field is given by

$$\frac{d\rho_E}{d\ln k}=\frac{1}{2\pi^2}\; kf^2(t)\left|\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\mathcal{A}(t,k)}{f(t)}\right)\right|^2 \quad (177)$$

In order to check that the back-reaction problem is absent, one needs to verify that the following condition is satisfied for all modes with $k<k_{diff}$[2]:

$$\frac{d\rho_E}{d\ln k}\Big|_{inf}+\frac{d\rho_B}{d\ln k}\Big|_{inf}<\rho_{inf} \quad (178)$$

Where ρ_{inf} is the energy density of the inflation field during inflation. Using, $\rho=\int_{k_i}^{k_e}\frac{d\rho}{d\ln k}\frac{dk}{k}$,we obtain the following equations for the electric and magnetic energy densities:

$$\rho_B=\frac{\Lambda^8}{6+2\alpha}\left[1-e^{-N_e(6+2\alpha)}\right] \quad (179)$$

$$\rho_E=\frac{\Lambda^8}{4+2\alpha}\left[1-e^{-N_e(4+2\alpha)}\right] \quad (180)$$

Where $N=60$
$\Lambda^2\approx H=constant.$

1.For $\alpha\in(-2;-1/2)$, the main contribution to the energy densities comes from large momenta $k\sim a_e H$.Therefore,

$$\rho_B\sim\rho_E\sim\Lambda^8\sim H^4\ll\rho_{inf}=3H^2M_p^2\sim\Lambda^4 \quad (181)$$

The back-reaction is absent for $H\ll M_p$.

2. For $\alpha\in(-3;-2)$, the magnetic energy density is determined by short-wavelength modes $k\sim a_e H$ and cannot cause back-reaction similarly to the previous case. However, the electric power spectrum is dominated by long modes with $k\sim a_i H$.

$$\rho_E\sim\Lambda^8 e^{2N_e(|\alpha|-2)}\gg\rho_B\sim\Lambda^8 \quad (182)$$

Therefore, the electric component determines back-reaction which can be neglected for

$$\Lambda^8 e^{2N_e(|\alpha|-2)}\lesssim\rho_{inf}\sim\Lambda^4\Longrightarrow|\alpha|<2+\frac{2}{N_e}\ln\frac{M_p}{\Lambda} \quad (183)$$

In general,

$$\rho_E=\frac{H^4}{2\pi^2}\frac{\mathcal{F}(\alpha)}{2|\alpha|-4}e^{2N_e(|\alpha|-2)} \quad (184)$$

Therefore, the electric component determines back-reaction. It can be neglected if $\rho_E<\rho_{inf}$that implies

$$|\alpha|<2+\frac{1}{N_e}\left(\ln\frac{M_p}{H}+\frac{1}{2}\ln\frac{12\pi^2(|\alpha|-2)}{\mathcal{F}(\alpha)}\right) \quad (185)$$

3. For $\alpha<-3$, the leading contribution to the electric and magnetic energy densities is given by long-wavelength $k\sim a_i H$ which cross the horizon at the beginning of inflation. Although both components could attain very large values, the main effect is due to the electric component as it has two more powers of a_e/a_i. The condition to avoid the back-reaction is, thus, the same as in the previous case.

We would like to mention that in order to estimate the `critical' value of _ for which the back-reaction problem occurs, one can use the Hubble parameter $H=H_*$ because it varies very slowly during inflation. On the other hand, the situation with N_e is more delicate. If we assume that inflation lasts only from the moment when the pivot scale crosses the horizon, then we may set $N_e=N_*$. In this case for $N_*=60$ and $f=7.5M_p$, we have $\alpha\gtrsim-2.2$. However, in more realistic situation, inflation can last many e-folds before the pivot scale horizon crossing and a lot of modes which are longer than the pivot one (and, therefore, are not physically relevant at the present epoch) would be also enhanced and contribute to the energy density. In this case, one would not deal with the back-reaction problem only in the case of scale-invariant or blue electric power spectrum, i.e. for $\alpha\geq-2$.

In order to investigate the most favorable case, we assume that enhancement occurs only for the modes shorter than the pivot scale K_* . In this case, we numerically solve the mode equation (67) for all modes which cross the horizon during inflation and plot the corresponding electric and magnetic power spectra in Fig. 1. In our numerical simulations, we set $N_*=60$ and $=7.5M_p$. The numerical results nicely confirm the theoretical constraint $\alpha>-2.2$ for the absence of the back-reaction. In view of

$$\rho_E\sim\Lambda^8 e^{2N_e(|\alpha|-2)}\gg\rho_B\sim\Lambda^8 e^{2N_e(|\alpha|-3)} \quad (186)$$

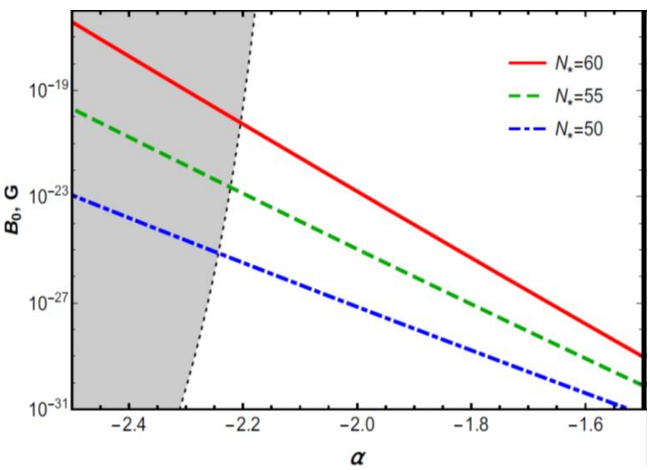


Fig. 5. The present day value of the magnetic field as a function of α for different number of e-folds $N_*=50,55,60$.

the electric component again determines back-reaction and the range of allowed values of α is the same as in Eq.(183).

For $f = 7.5M_p$ and, $N_e = 60$,we have $\Lambda = 5.9 \times 10^{-3} M_p$.Then the allowed range $\alpha > -2.17$and the magnetic power spectrum equals

$$\frac{d\rho_B}{d\ln k} = \frac{H^4}{2\pi^2} \mathcal{F}(1+\alpha)\left(\frac{k}{aH}\right)^{6+2\alpha} \quad (187)$$

8. Magnetic field at present epoch

The magnetic field at the present time could be estimated as

$$B_0 = \left(\frac{a_e}{a_0}\right)^2 \sqrt{2\int_{a_i H}^{k_{diff}} \frac{dk}{k}\frac{d\rho_B}{d\ln k}} \quad (188)$$

Where k_{diff} is the momentum which now corresponds to the cosmic diffusion scale, i.e., the smallest size of magnetic configuration which can survive the diffusion in the late stages of the Universe evolution. It could be estimated as $k_{diff}/a_0 \sim 1A.U^{-1} = 1.3 \times 10^{27} Gev$[13].

$6 + 2\alpha > 0$ in the region without back-reaction, the magnetic power spectrum has a blue tilt and, therefore, the main contribution to magnetic field comes from the upper integration region

$$B_0 = \left(\frac{a_e}{a_0}\right)^2 \frac{H^2}{2\pi}\sqrt{\frac{2\mathcal{F}(1+\alpha)}{3+\alpha}}\left(\frac{k_{diff}}{a_e H}\right)^{3+\alpha} \quad (189)$$

The value of a_0/a_e can be found by using the fact that the pivot scale k_* crosses the horizon N_*e-folds before the end of inflation

$$\frac{a_0}{a_e} = \frac{a_*}{a_e}\frac{a_0 H_*}{k_*} = e^{-N_*}\frac{a_0 H_*}{k_*} \quad (190)$$

Then the present day strength of the magnetic field equals

$$B_0 = \frac{M_p^2}{2\pi}\sqrt{\frac{2\mathcal{F}(\alpha)}{3+\alpha}}\left[\frac{k_{diff}}{a_0 M_p}\right]^{3+\alpha}\left[\frac{k_* e^{N_*}}{a_0 M_p}\right]^{-1-\alpha} =$$
$$= (1.6 \times 10^{-23} G)\sqrt{\frac{2\mathcal{F}(\alpha)}{3+\alpha}}\left[\frac{1.03 \times 10^{14}}{exp(N_*)}\right]^{\alpha+2} \times$$
$$\times \left[\frac{k_{diff}/a_0}{1A.U^{-1}}\right]^{3+\alpha}\left[\frac{k_*/a_0}{0.002\,Mpc^{-1}}\right]^{-1-\alpha} e^{N_*-60} \quad (191)$$

Now setting f and N_* we calculate H_* and using Eq. (191) determine the allowed region for α. Then using Eq. (189), we compute the present day value of magnetic field B_0 which is shown in Fig. 5 for $f = 7.5M_p$ and three different e-fold numbers N_*. In the calculations, we used the standard values of the pivot scale ($k_*/a_0 = 0.002 Mpc^{-1}$ as given by by the Planck Collaboration [3]) and the cosmic diffusion scale ($k_{diff}/a_0 = 1A.U^{-1}$ from[13]).

Unfortunately, the value of B_0 is considerably smaller than the lower bound required by distant blazars observations [17-20]. The power spectrum of the magnetic field has a blue tilt because the spectral index is positive

$$n_B = 6 + 2\alpha > 0 \quad (192)$$

This means that the coherence length of such magnetic fields is only of the order of cosmic diffusion scale, i.e. 1 A.U.The amplitude of primordial scalar and tensor perturbations can be found from Eqs.(136,138) and is given by [56, 58]

$$n_s = 1 - 6\epsilon_* + 2\eta_* \quad (193)$$

$$r = 16\epsilon_* \quad (194)$$

Where the quantities with asterisk should be taken at N_* e-folds before the end of inflation when the pivot scale k_* crosses the horizon. Using Eqs. (36) and (37), we find

$$n_s = 1 - \frac{2}{\beta} - \frac{4}{\beta}\left[e^{2N_*/\beta}\left(1+\frac{1}{\beta}\right) - 1\right]^{-1} \quad (195)$$

$$r = \frac{16}{\beta}\left[e^{2N_*/\beta}\left(1+\frac{1}{\beta}\right) - 1\right]^{-1} \quad (196)$$

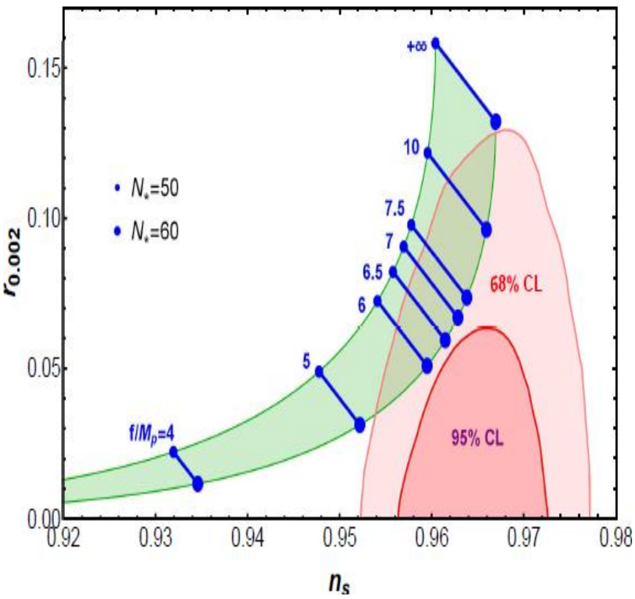


Fig. 6. Theoretical prediction for n_s and r from natural inflation model (region between two growing curves) for $50 < N_* < 60$ and $0 < f/M_p < \infty$,and marginalized joint 68 CL and 95% CL regions for n_s ns and r at $k_* = 0.002 M_{pc}^{-1}$ [3].

For given N_* and f, these equations parametrically determine a point on the (n_s, r) diagram, which is often used to constrain inflationary models. Fig. 6 shows such a diagram for the natural inflation model. The region between two growing curves is filled with points which can be achieved by variation of the model parameters $50 < N_* < 60$ and $0 < \frac{f}{M_p} < +\infty$. Thick lines correspond to fixed values of f which are written near the corresponding lines. Smaller points correspond to $N_* = 50$, larger ones to $N_* = 60$ and the lines connecting them correspond to intermediate values. For comparison we also show the marginalized joint 68% confidence level (CL) and 95% CL regions for n_s and rr at $k_* = 0.002Mpc^{-1}$ from the latest Planck observations [3].Using Eqs.(36), (37), (170), and the explicit form of potential, i.e. Eq.(163), we obtain

$$\epsilon = \frac{M_{pl}^2}{2f^2}\cot^2\frac{\phi}{2f}\ ,\eta = \epsilon - \frac{M_{pl}^2}{2f^2} \tag{197}$$

As we discussed before the most favorable value corresponds to $\sim 7M_p$. More precisely, the analysis carried out in Ref. [3] by the Planck collaboration gives at 95% CL that $\log_{10}\left(\frac{f}{M_p}\right) > 0.84$, i.e., $\frac{f}{M_p} \gtrsim 6.91$. The value of Λ in the potential in Eq.(163) can be obtained by the requirement that the amplitude of primordial scalar perturbations at N_* e-folds before the end of inflation equals [3]the value defined in Eq.(172). By using Eq.(173), we find

$$\left(\frac{\Lambda}{M_p}\right)^2 = \sqrt{\frac{2}{3}\frac{2\pi\sqrt{P_\zeta}}{f/M_p}\frac{\cos(\phi/2f)}{\sin^2(\phi/2f)}}\ \Big|_{N_*} \tag{198}$$

The scalar field value at N_* e-folds before the end of inflation is given by Eq. (170). Then for given N_* and f we can determine the values of Λ and H_*. The corresponding dependencies are shown in Fig. 7.Without the loss of generality, we can choose the initial moment of time at $N_{tot} = N_*$e-folds before the end of inflation when the physically relevant modes start to cross the horizon. Therefore, we have $\phi_i = \phi(N_*)$. For example, for $N_* = 60$ and $f = 7.5M_p$, we obtain $\phi_i = 14.2M_p$ and $\Lambda = 6.5 \times 10^{-3}M_p = 1.56 \times 10^{16}Gev$. Using these initial conditions, we find numerically the solutions of Eqs. (28), (25) and use them to find the power spectra of generated electromagnetic fields.

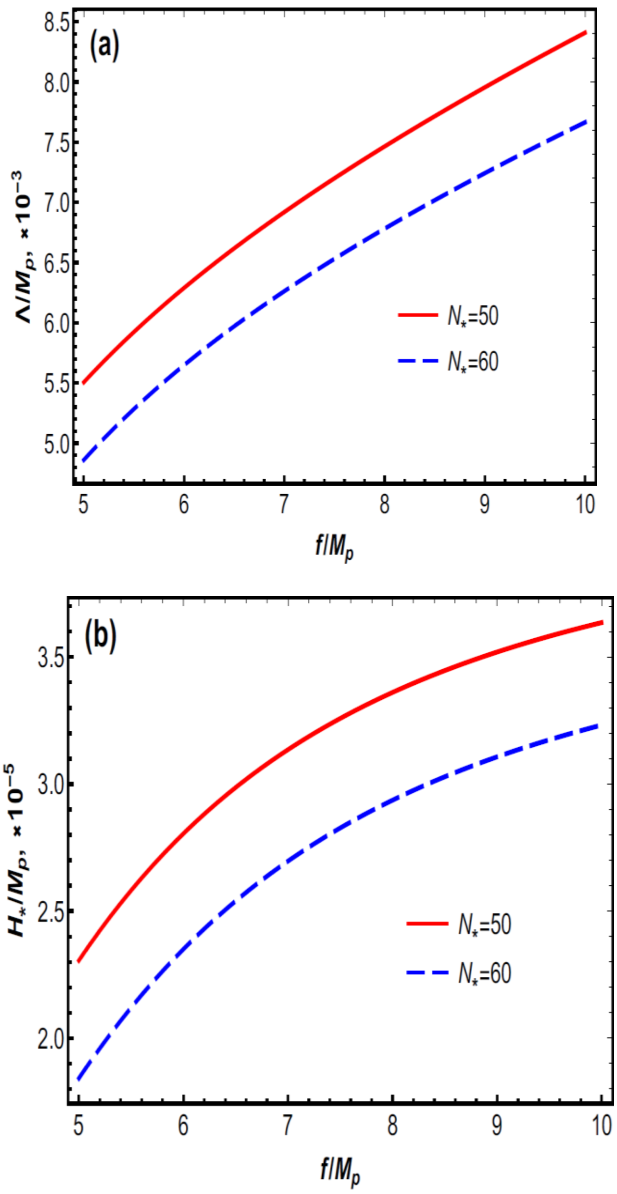


Fig. 7. The parameter Λ (panel a) and the Hubble parameter at the moment of the pivot scale horizon crossing H_*(panel b) as functions of f for fixed $N_* = 50$ (solid lines) and $N_* = 60$ (dashed lines) obtained from Eqs. (198).

9. Summary and conclusion

In this paper, we reviewed the generation of magnetic field in the early Universe during inflation and preheating .We considered the natural inflation model, which is one of the favored models according to the latest results of the Planck Collaboration [3]. In order to break the conformal invariance of the electromagnetic action, we considered the kinetic coupling $f^2(\phi)FF$ of the inflation field with the electromagnetic field through the coupling function, which behaves like a negative power of the scale factor $f \propto a^\alpha, \alpha < 0$.Since $f = 1$ at the end of inflation and is a decreasing function, the strong coupling problem does not occur during inflation [60].

We performed the slow-roll analysis and compared the predictions of the model with observational results of the Planck Collaboration [3]. In our numerical simulations we used the values of the model parameters which are in the best accordance with observational data and provide the correct amplitude of scalar primordial perturbations. Using them, we solved the background equations which govern the evolution of the scale factor and the inflation field.

The simple choice of the coupling function allowed us to use the well-known analytic expressions for the electromagnetic power spectra from Ref. [2] and to determine the range of parameters for which the back-reaction problem does not occur. Then we determined the power spectra numerically and confirmed the correctness of our analytical estimates. Finally, we considered the subsequent evolution of the generated magnetic fields up to present epoch.

Taking into account only the modes which can survive the cosmic diffusion during the Universe lifetime, we calculated the present value of the large-scale magnetic field.

Acknowledgments

I thanks E.V. Gorbar and S.I. Vilchinskii for useful discussions and comments.

Список використаних джерел

1. *Landau L., Lifshitz E.* Quantum mechanics. Non-relativistic theory-Butterworth-Heinemann- Oxford, 2004.
2. *Martin J., Yokoyama J.* , Generation of large-scale magnetic fields in single-field inflation/J.Martin// JCAP 01, 025 (2008).
3. *Ade P. A. R. et al*. (Planck Collaboration), Planck 2015 results. XX. Constraints on inflation/P.A.R.et al// Astron. Astrophys. 594, A20 (2016).
4. *Martin J., Ringeval C. , Vennina V.* Encyclopaedia inationaris/J.Martin and C.Ringeval and V.Vennina// Phys. Dark Universe 5-6, 75 (2014).
5. *Kim J. E . Nilles H. P , Peloso M.* Completing natural inflation/J.E.Kim and H.P.Pelloso// JCAP 01, 005 (2005).
6. *Kronberg P. P.* Extragalactic magnetic fields/P.P.Kronberg// Rep. Prog. Phys. 57, 325 (1994).
7. *Grishchuk L. P.* Amplification of gravitational waves in an isotropic universe/L.P.Grishchuk// Sov. Phys. JETP 40, 409 (1975).
8. *Rubakov V. A. , Sazhin M. V. , Veryaskin A. V.*Graviton creation in the inflationary universe and the grand unification scale/V.A.Rubakov and M.V.Sazhin and A.V.Veryaskin// Phys. Lett. B 115, 189 (1982).
9. *Parker L.* Particle creation in expanding universes/L.Parker// Phys. Rev. Lett. 21. 562 (1968).
10. *Giovannini M.* , The magnetized universe/M.Giovannini// Int. J. Mod. Phys.D 13, 391 (2004).
11. *Widrow L. M.* Origin of galactic and extragalactic magnetic fields/L.M Widrow// Rev. Mod. Phys. 74, 775 (2002).

References

1. LANDAU L., LIFSHITZ E. (2004) *Quantum mechanics. Non-relativistic theory*-Butterworth-Heinemann- Oxford,.
2. MARTIN J., YOKOYAMA J., (2008) Generation of large-scale magnetic fields in single-field inflation/J.Martin// JCAP 01, 025.
3. ADE P. A. R. et.al. (2016) (Planck Collaboration), Planck 2015 results. XX. Constraints on inflation/P.A.R.et al// Astron. Astrophys. 594, A20.
4. MARTIN J., RINGEVAL C , *Vennina V.* Encyclopaedia inationaris/J.Martin and C.Ringeval and V.Vennina// Phys. Dark Universe 5-6, 75 (2014).
5. KIM J. E . NILLES H. P , *Peloso M.* Completing natural inflation/J.E.Kim and H.P.Pelloso// JCAP 01, 005 (2005).
6. KRONBERG P. P. (1994) Extragalactic magnetic fields/P.P.Kronberg// Rep. Prog. Phys. 57, 325
7. GRISHCHUK L. P. (1975) Amplification of gravitational waves in an isotropic universe/L.P.Grishchuk// Sov. Phys. JETP 40, 409.
8. RUBAKOV V. A., SAZHIN M. V., VERYASKIN A.V. (1982) Graviton creation in the inflationary universe and the grand unification scale/V.A.Rubakov and M.V.Sazhin and A.V.Veryaskin// Phys. Lett. B 115, 189.
9. PARKER L. (1968) Particle creation in expanding universes/L.Parker// Phys. Rev. Lett. 21. 562.
10. GIOVANNINI M., (2004) The magnetized universe/M.Giovannini// Int. J. Mod. Phys.D 13, 391.
11. WIDROW L. M. Origin of galactic and extragalactic magnetic fields/L.M Widrow// Rev. Mod. Phys. 74, 775 (2002).

12. *Kandus A. , Kunze K. E. , Tsagas C. G.* Primordial magnetogenesis/A.Kandus and K.E.Kunze and C.G.Tsagas// Phys. Rep. 505, 1 (2011).
13. *Grasso D. Rubinstein H. R* Magnetic fields in the early universe/D.Grasso and H.R.Rubinstein// Phys. Rep. 348, 163 (2001).
14. *Durrer R., Neronov A.* Cosmological magnetic fields: their generation, evolution and observation/ R. Durrer and A. Neronov// Astron. Astrophys. Rev. 21, 62 (2013).
15. *Subramanian K.* The origin, evolution and signatures of primordial magnetic fields/ K. Subramanian// Rep. Prog. Phys. 79, 076901 (2016).
16. *Sutton D. R. , Feng C. , Reichardt C. L.* Current and Future Constraints on Primordial Magnetic Fields/ D. R. Sutton and C. Feng and C. L. Reichardt //arXiv:1702.01871.
17. *Neronov A., Vovk I.* Evidence for strong extragalactic magnetic fields from Fermi observations of TeV blazars/ A. Neronov and I. Vovk// Science 328, 73 (2010).
18.*Taylor. A. M. , Vovk I. , Neronov A.* Extragalactic magnetic fields constraints from simultaneous GeV-TeV observations of blazars/ A. M. Taylor and I. Vovk and A. Neronov// Astron. Astrophys. 529, A144 (2011).
19. *Tavecchio F. , Ghisellini G. , Foschini L. , Bonnoi G., Ghirlanda G. , P. Coppi* The intergalactic magnetic field constrained by Fermi/LAT observations of the TeV blazar/ F. Tavecchio and G. Ghisellini and L. Foschini and G. Bonnoli and G. Ghirlanda and P. Coppi// 1ES 0229 + 200, Mon. Not. R. Astron. Soc. 406, L70(2010).
20. *Caprini C., Gabici S.*Gamma-ray observations of blazars and the intergalactic magnetic field spectrum/ C. Caprini and S. Gabici// Phys. Rev. D 91, 123514 (2015).
21. *Hogan C. J.* Magnetohydrodynamic Effects of a First-Order Cosmological Phase Transition/ C. J. Hogan// Phys. Rev. Lett. 51, 1488
(1983).
22. *Quashnock J. M. , A. Loeb, and D. N. Spergel,* Magnetic field generation during the cosmological QCD phase transition/ J. M. Quashnock and A. Loeb, and D. N. Spergel// Astrophys. J. 344, L49 (1989).
23. *Vachaspati T.* Magnetic fields from cosmological phase transitions/ T. Vachaspati //Phys. Lett. B 265, 258 (1991).

12. KANDUS A. , KUNZE K. E. , TSAGAS C. G. Primordial magnetogenesis/A.Kandus and K.E.Kunze and C.G.Tsagas// Phys. Rep. 505, 1 (2011).
13. GRASSO D. RUBINSTEIN H. R Magnetic fields in the early universe/D.Grasso and H.R.Rubinstein// Phys. Rep. 348, 163 (2001).
14. DURRER R., NERONOV A. Cosmological magnetic fields: their generation, evolution and observation/ R. Durrer and A. Neronov// Astron. Astrophys. Rev. 21, 62 (2013).
15. SUBRAMANIAN K. The origin, evolution and signatures of primordial magnetic fields/ K. Subramanian// Rep. Prog. Phys. 79, 076901 (2016).
16. SUTTON D. R. , FENG C. , *Reichardt C. L.* Current and Future Constraints on Primordial Magnetic Fields/ D. R. Sutton and C. Feng and C. L. Reichardt //arXiv:1702.01871.
17. NERONOV A., VOVK I. Evidence for strong extragalactic magnetic fields from Fermi observations of TeV blazars/ A. Neronov and I. Vovk// Science 328, 73 (2010).
18.TAYLOR. A. M. , VOVK I. , NERONOV A. Extragalactic magnetic fields constraints from simultaneous GeV-TeV observations of blazars/ A. M. Taylor and I. Vovk and A. Neronov// Astron. Astrophys. 529, A144 (2011).
19. TAVECCHIO F. , GHISELLINI G. , FOSCHINI L. , BONNOI G., GHIRLANDA G. , P. COPPI The intergalactic magnetic field constrained by Fermi/LAT observations of the TeV blazar/ F. Tavecchio and G. Ghisellini and L. Foschini and G. Bonnoli and G. Ghirlanda and P. Coppi// 1ES 0229 + 200, Mon. Not. R. Astron. Soc. 406, L70(2010).
20. CAPRINI C., GABICI S.Gamma-ray observations of blazars and the intergalactic magnetic field spectrum/ C. Caprini and S. Gabici// Phys. Rev. D 91, 123514 (2015).
21. HOGAN C. J. Magnetohydrodynamic Effects of a First-Order Cosmological Phase Transition/ C. J. Hogan// Phys. Rev. Lett. 51, 1488
(1983).
22. QUASHNOCK J. M. , A. LOEB, AND D. N. SPERGEL, Magnetic field generation during the cosmological QCD phase transition/ J. M. Quashnock and A. Loeb, and D. N. Spergel// Astrophys. J. 344, L49 (1989).
23. VACHASPATI T. Magnetic fields from cosmological phase transitions/ T. Vachaspati //Phys. Lett. B 265, 258 (1991).

24. *Cheng B.-L., Olinto A. V.* Primordial magnetic fields generated in the quark - hadron transition/ B.-L. Cheng and A. V. Olinto// Phys. Rev. D 50,2421 (1994).
25. *Sigl G. , Olinto A. V., Jedamzik K.* Primordial magnetic fields from cosmological first order phase transitions/ G. Sigl, A. V. Olinto, and K. Jedamzik// Phys.Rev. D 55 , 4582 (1997).
26. *Ahonen J., Enqvist K.* Magnetic field generation in first order phase transition bubble collisions/ J. Ahonen and K. Enqvist //Phys. Rev. D 57, 664(1998).
27.. *Turner M. S, Widrow L. M.* Inflation produced, large scale magnetic fields/. M. S. Turner and L. M. Widrow// Phys. Rev. D 37, 2743 (1988).
28. *Mukhanov V. F. , Chibisov G. V.* Quantum fluctuations and a nonsingular universe/ . V. F. Mukhanov and G. V. Chibisov //JETP Lett. 33, 532 (1981).
29. *Hawking S. W.* The development of irregularities in a single bubble inflationary universe/ S. W. Hawking// Phys. Lett. 115B, 295 (1982).
30. *Starobinsky A. A* Dynamics of phase transition in the new inflationary universe scenario and generation of perturbations/ A. A. Starobinsky //Phys. Lett. 117B, 175 (1982).
31.*Guth. A. H. , Pi S. Y.* Fluctuations in the New Inflationary Universe/ A. H. Guth and S. Y. Pi// Phys. Rev. Lett. 49, 1110 (1982).
32. *Bardeen J. M., Steinhardt P. J., Turner M. S.* Spontaneous creation of almost scale - free density perturbations in an inflationary universe/. J. M. Bardeen, P. J. Steinhardt, and M. S. Turner// Phys. Rev. D 28, 679 (1983).
33. *Starobinsky A. A.* Spectrum of relict gravitational radiation and the early state of the universe/ A. A. Starobinsky //JETP Lett. 30, 682 (1979).
34. *Ratra B.* Cosmological seed magnetic field from inflation/ B. Ratra //Astrophys. J. 391, L1 (1992).
35. *Dolgov A. D.* Breaking of conformal invariance and electromagnetic field generation in the universe/ A. D. Dolgov// Phys. Rev. D 48, 2499(1993).
36. *Gasperini M., Giovannini M., Veneziano G.*Primordial Magnetic Fields from String Cosmology/ M. Gasperini and M. Giovannini, and G. Veneziano// Phys. Rev. Lett.75,3796 (1995).
37. *Giovannini M.* Magnetogenesis and the dynamics of internal dimensions/ M. Giovannini// Phys. Rev. D 62, 123505 (2000).
38. *Atmjeet K., Pahwa I., Seshadri T. R., Subramanian K.* Cosmological magnetogenesis from extra-dimensional gauss bonnet gravity/ K. Atmjeet, I. Pahwa, T. R. Seshadri, and K. Subramanian// Phys. Rev. D 89, 063002 (2014).

24. CHENG B.-L., OLINTO A. V. (1994) Primordial magnetic fields generated in the quark - hadron transition/ B.-L. Cheng and A. V. Olinto// Phys. Rev. D 50,2421
25. SIGL G. , OLINTO A. V., JEDAMZIK K. (1997) Primordial magnetic fields from cosmological first order phase transitions. Phys.Rev. D 55 , 4582.
26. AHONEN J., ENQVIST K. Magnetic field generation in first order phase transition bubble collisions/ J. Ahonen and K. Enqvist //Phys. Rev. D 57, 664(1998).
27.. TURNER M. S, WIDROW L. M. Inflation produced, large scale magnetic fields/. M. S. Turner and L. M. Widrow// Phys. Rev. D 37, 2743 (1988).
28. MUKHANOV V. F. , CHIBISOV G. V. Quantum fluctuations and a nonsingular universe/ . V. F. Mukhanov and G. V. Chibisov //JETP Lett. 33, 532 (1981).
29. HAWKING S. W. The development of irregularities in a single bubble inflationary universe/ S. W. Hawking// Phys. Lett. 115B, 295 (1982).
30. STAROBINSKY A. A Dynamics of phase transition in the new inflationary universe scenario and generation of perturbations/ A. A. Starobinsky //Phys. Lett. 117B, 175 (1982).
31.GUTH. A. H. , PI S. Y. Fluctuations in the New Inflationary Universe/ A. H. Guth and S. Y. Pi// Phys. Rev. Lett. 49, 1110 (1982).
32. BARDEEN J. M., STEINHARDT P. J., TURNER M. S. Spontaneous creation of almost scale - free density perturbations in an inflationary universe/. J. M. Bardeen, P. J. Steinhardt, and M. S. Turner// Phys. Rev. D 28, 679 (1983).
33. STAROBINSKY A. A. (1979) Spectrum of relict gravitational radiation and the early state of the universe/ A. A. Starobinsky //JETP Lett. 30, 682.
34. RATRA B. (1992) Cosmological seed magnetic field from inflation/ B. Ratra //Astrophys. J. 391, L1.
35. DOLGOV A. D. (1993) Breaking of conformal invariance and electromagnetic field generation in the universe/ A. D. Dolgov// Phys. Rev. D 48, 2499.
36. GASPERINI M., GIOVANNINI M., VENEZIANO G.Primordial Magnetic Fields from String Cosmology/ M. Gasperini and M. Giovannini, and G. Veneziano// Phys. Rev. Lett.75,3796 (1995).
37. GIOVANNINI M. Magnetogenesis and the dynamics of internal dimensions/ M. Giovannini// Phys. Rev. D 62, 123505 (2000).
38. ATMJEET K., PAHWA I., SESHADRI T. R., SUBRAMANIAN K. Cosmological magnetogenesis from extra-dimensional gauss bonnet gravity/ K. Atmjeet, I. Pahwa, T. R. Seshadri, and K. Subramanian// Phys. Rev. D 89, 063002 (2014).

39. *Starobinsky A. A.* A new type of isotropic cosmological models without singularity/. A. A. Starobinsky// Phys. Lett. 91B, 99 (1980).
40. *Vilchinskii S., Sobol O., Gorbar E. V., Rudennok I.* Magnetogenesis during inflation and preheating in the Starobinsky
Model/ S. Vilchinskii and O. Sobol and E. V. Gorbar and I. Rudennok// Phys. Rev. D 95, 083509 (2017).
41. *Kobayashi T.* Primordial magnetic fields from the post inflationary universe/ T. Kobayashi// J. Cosmol. Astropart. Phys. 05, 040 (2014).
42. *Lyth D. and Liddle A.* The primordial density perturbation -Cambridge University Press- 2009.
43. *Barrow J. D., Maartens R., Tsagas C. G.* Cosmology with inhomogeneous magnetic fields/ . J. D. Barrow and R. Maartens, and C. G. Tsagas //Phys. Rep. 449, 131 (2007).
44. *Riess A. G. et al*/ A. G. Riess et al// Astron. J. 116, 1009 (1998).
45. *Martin J., Schwarz D. J.* The precision of slow-roll predictions for the CMBR anisotropies/ J. Martin and D. J. Schwarz// Phys. Rev. D 62, 103520(2000).
46. *Faulkner T., Tegmark M., Bunn E. F., Mao Y.* Constraining f (R) gravity as a scalar tensor theory/ T. Faulkner and M. Tegmark and E. F. Bunn, and Y. Mao// Phys. Rev. D 76, 063505 (2007).
47. *Martin J. Ringeval C.* Inflation after WMAP3: Confronting the slow-roll and exact power spectra to CMB data/ J. Martin and C. Ringeval// J. Cosmol. Astropart. Phys. JCAP 08, 009 (2006).
48. *Lorenz L., Martin J., Ringeval C.* Brane inflation and the WMAP data: a Bayesian analysis/ L. Lorenz and J. Martin and C. Ringeval // arXiv:0709.3758.
49. *Sikivie P.*/ P. Sikivie// arXiv:0909.0949.
50. *Kim S. A., Liddle A. R., Seery D.* Non-gaussianity in axion N-flation models/ S. A. Kim, A. R. Liddle, and D. Seery// Phys. Rev. Lett. 105, 181302 (2010).
51. *Freese K., Frieman J. A., Olinto A. V.* Natural inflation with pseudo Nambu-Goldstone bosons/ K. Freese, J. A. Frieman, and A. V. Olinto //Phys. Rev. Lett. 65,3233 (1990).
52. *Sikivie P.* Dark matter axions/. P. Sikivie// arXiv:0909.0949.

39. STAROBINSKY A. A. A new type of isotropic cosmological models without singularity/. A. A. Starobinsky// Phys. Lett. 91B, 99 (1980).
40. VILCHINSKII S., SOBOL O., GORBAR E. V., RUDENNOK I. Magnetogenesis during inflation and preheating in the Starobinsky
Model/ S. Vilchinskii and O. Sobol and E. V. Gorbar and I. Rudennok// Phys. Rev. D 95, 083509 (2017).
41. KOBAYASHI T. Primordial magnetic fields from the post inflationary universe/ T. Kobayashi// J. Cosmol. Astropart. Phys. 05, 040 (2014).
42. LYTH D. AND LIDDLE A. The primordial density perturbation -Cambridge University Press- 2009.
43. BARROW J. D., MAARTENS R., TSAGAS C. G. Cosmology with inhomogeneous magnetic fields/ . J. D. Barrow and R. Maartens, and C. G. Tsagas //Phys. Rep. 449, 131 (2007).
44. *Riess A. G. et al*/ A. G. Riess et al// Astron. J. 116, 1009 (1998).
45. MARTIN J., SCHWARZ D. J. The precision of slow-roll predictions for the CMBR anisotropies/ J. Martin and D. J. Schwarz// Phys. Rev. D 62, 103520(2000).
46. FAULKNER T., TEGMARK M., BUNN E. F., MAO Y. Constraining f (R) gravity as a scalar tensor theory/ T. Faulkner and M. Tegmark and E. F. Bunn, and Y. Mao// Phys. Rev. D 76, 063505 (2007).
47. MARTIN J. RINGEVAL C. (2006) Inflation after WMAP3: Confronting the slow-roll and exact power spectra to CMB data. J. Cosmol. Astropart. Phys. JCAP 08, 009.
48. LORENZ L., MARTIN J., RINGEVAL C. Brane inflation and the WMAP data: a Bayesian analysisarXiv:0709.3758.
49. SIKIVIE P, P. SIKIVIE arXiv:0909.0949.
50. KIM S. A., LIDDLE A. R., SEERY D. Non-gaussianity in axion N-flation models/ S. A. Kim, A. R. Liddle, and D. Seery// Phys. Rev. Lett. 105, 181302 (2010).
51. FREESE K., FRIEMAN J. A., OLINTO A. V. Natural inflation with pseudo Nambu-Goldstone bosons. *Phys. Rev. Lett*. 65,3233 (1990).
52. SIKIVIE P. Dark matter axions/. P. Sikivie// arXiv:0909.0949.

53. *Adams F. C., Bond J. R., Freese K., Frieman J. A., Olinto A. V.*, Natural inflation: Particle physics models, Power law spectra for large-scale structure, and conditions from COBE/ F. C. Adams, J. R. Bond and K. Freese and J. A. Frieman, and A. V. Olinto// Phys.Rev. D 47, 426 (1993).

54. *Elliston J., Mulryne D. J., Seery D. Tavakol R.* Evolution of f_{nl} to the adiabatic limit/. J. Elliston and D. J. Mulryne and D. Seery and R. Tavakol// arXiv:1106.2153.

55*Guth. A. H.* The inflationary universe: a possible solution to the horizon and flatness problems/. A. H. Guth// Phys. Rev. D 23, 347(1981).

56. *Martin J., Ringeval C., Vennina V.*, Encyclopedia inflationaris/. J. Martin, C. Ringeval, and V. Vennin// Phys. Dark Universe 5-6, 75 (2014).

57*Kim. J. E., Nilles H. P., Peloso M.* Completing natural inflation/. J. E. Kim, H. P. Nilles, and M. Peloso// JCAP 01, 005 (2005).

58. *Gorbunov D. S., Rubakov V. A.* Introduction to the Theory of the Early Universe: Cosmological Perturbations and
Inflationary Theory -World Scientific Publishing- Singapore- 2011.

59. *Liddle A. R., Parsons P., Barrow J. D.* Formalizing the slow roll approximation in inflation/ A. R. Liddle and P. Parsons, and J. D. Barrow// Phys. Rev. D 50, 7222(1994).

60. *Demozzi V., Mukhanov V. M., Rubinstein H.* Magnetic fields from inflation/ J. Cosmol / V. Demozzi and V. M. Mukhanov and H. Rubinstein// . Astropart .Phys. 08, 025(2009).

53. ADAMS F. C., BOND J. R., FREESE K., FRIEMAN J. A., OLINTO A. V. (1993) Natural inflation: Particle physics models, Power law spectra for large-scale structure, and conditions from COBE Phys.Rev. D 47, 426.

54. ELLISTON J., MULRYNE D. J., SEERY D. TAVAKOL R. Evolution of f_{nl} to the adiabatic limit arXiv:1106.2153.

55.GUTH. A. H. (1981) The inflationary universe: a possible solution to the horizon and flatness problems/. A. H. Guth// Phys. Rev. D 23, 347.

56. MARTIN J., RINGEVAL C., VENNINA V., (2014) Encyclopedia inflationaris. Phys. Dark Universe 5-6, 75.

57.KIM. J. E., NILLES H. P., PELOSO M. (2005) Completing natural inflation. JCAP 01, 005.

58. GORBUNOV D. S., RUBAKOV V. A. 2011 Introduction to the Theory of the Early Universe: Cosmological Perturbations and Inflationary Theory -World Scientific Publishing- Singapore-.

59. LIDDLE A. R., PARSONS P., BARROW J. D. (1994) Formalizing the slow roll approximation in inflation. Phys. Rev. D 50, 7222.

60. DEMOZZI V., MUKHANOV V. M., RUBINSTEIN H. (2009) Magnetic fields from inflation/ J. Cosmol. Astropart .Phys. 08, 025.

Надійшла до редколегії 28.05.18

УДК 535.12

Кончук Г.Л., к.ф-м.н., доц.

Фізичний вакуум як транспорт електромагнітного збудження

Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т. Глушкова 4а,
e-mail: lukichu@i.ua

G. L. Kononchuk, PhD.

Physical vacuum as a transport of electromagnetic excitation

Taras Shevchenko National University of Kyiv, 83000, Kyiv, Glushkov ave., 4a,
e-mail: lukichu@i.ua

У статті, ґрунтуючись на усталених уявленнях, достовірних фактах та явищах, запропоновано якісну модель розповсюдження світла в фізичному вакуумі. Використано припущення про фізичний вакууму як про діелектричне середовище. Вказано про необхідність врахування ефекту Доплера для визначення частоти перевипроміненої хвилі.Показано, що не існує проблеми дуалізму хвиля-частинка. Світло виникає і реєструється за допомогою реальних частинок в крайніх точках траєкторії розповсюдження, а існує (розповсюджується) як хвильовий процес в специфічному середовищі. Традиційні способи реєстрації світла, що використовують явища фотографії та фотоефекту, викликали хибне ототожнення світла з частинкою. Запропонована модель дає пояснення, чому енергія світлової хвилі визначається виключно частотою. У термінах запропонованої моделі наведено пояснення постійності швидкості світла, що постулюють у спеціальній теорії відносності та взаємодії електромагнітних хвиль із гравітуючими об'єктами. Також, запропонована модель надає пояснення результатів відомих фундаментальних дослідів Майкельсона-Морлі та Фізо.

Ключові слова: світло, дуалізм хвиля-частинка, фізичний вакуум, віртуальні частинки, гравітаційна лінза.

In the paper, based on the established representations, reliable facts and phenomena, a qualitative model of light propagation in a physical vacuum is proposed. The assumption of physical vacuum as a dielectric medium is used. It is indicated that it is necessary to take into account the Doppler effect to determine the frequency of the redundant wave. It has been shown that there is no problem of wave-particle dualism. Light arises and is registered with the help of real particles at the extreme points of the propagation trajectory, and it exists (propagates) as a wave process in a specific environment. Traditional methods of recording light using photo and photo effects have caused the false identification of particle light. The proposed model gives an explanation of why the energy of the light wave is determined solely by frequency. In the terms of the proposed model, an explanation is given of the constancy of the speed of light postulated in the special theory of relativity and the interaction of electromagnetic waves with gravitating objects. Also, the proposed model provides an explanation of the results of the well-known fundamental experiments of Michelson-Morley and Fizeau.

Key words: light, wave-particle dualism, physical vacuum, virtual particles, gravitational lens.

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

Вступ та постановка задачі

Від Арістотеля до Ейнштейна і де Бройля наука, орієнтуючись на останні досягнення, неодноразово і радикально змінювала погляд на природу світла. Кожного разу рішення уявлялося остаточним тріумфом. Дослід Майкельсона-Морлі [1] продовжив цю традицію найбільш драматично. Об'єктивно світло демонструє хвильові властивості і ефект Доплера, отже, має просторову структуру в деякому квазістаціонарному середовищі (ефірі), проте середовище виявилося жорстко пов'язаним з лабораторною системою відліку, з чим важко погодитися, оскільки вибір системи довільний. Виявилися й інші ефекти, що викликають когнітивний дисонанс. Наприклад, галилеєва формула додавання швидкостей має неприйнятний для класики вигляд: $C + V = C$. Ця нелінійність додавання повинна мати джерело. Масштаби часу і простору за пропозицією Фітцджеральда і Лоренца змушено стали залежними від руху платформи. Природно, внаслідок деформації метрики в русі деформуються автоматично всі явища і величини, які вимірюються в базових одиницях (метр, кілограм, секунда), що виглядає парадоксально. Цей математичний волюнтаризм не є єдиним рішенням, проте реально система з такими дивними властивостями на той час не була знайдена. На цьому тлі парадокс хвиля-частинка вже сприймається як норма, хоча в природі хвиля це колективне явище, а частинка - виключно індивідуальне. Дослідження, що пропонується, спрямоване на усунення цих парадоксів.

Взаємодія фізичного вакууму та хвилі

Оскільки дослід Майкельсона-Морлі змінив кардинально уявлення про світоустрій, з'ясуємо який є інший варіант узгодити його з іншими достовірними фактами. Ключовим є питання - чи існують об'єкти або явища, крім світла, які так само жорстко прив'язані до системи відліку? Сьогодні таким можна вважати фізичний вакуум (ФВ) [2]. У роботі [3] висловлена гіпотеза, що таким об'єктом може бути середовище, що складається з колективу хаотично рухомих не взаємодіючих частинок, що не допускають локалізації. Саме абсолютний хаос виглядає однаково при погляді на нього з будь-якої рухомої в ньому системи відліку, оскільки передбачає наявність рівномірного спектра швидкостей, відсутність локальних особливостей, квазіпружних сил. Наявність заряду у частинок обумовлює їх взаємодію з електромагнітним полем. ФВ це, зокрема, пари частинок, що виникають на короткий час внаслідок флуктуації нульової енергії. Ці пари віртуальних частинок встигають вплинути на реальні процеси без конструктивного енергообміну (по типу темної матерії). Нульова енергія пари передбачає відсутність потенціальної енергії, впливу взаємного розташування на будь що. Тому ФВ можна уявити як специфічний діелектрик без поглинання і резонансних ефектів. Переміщення хвильового збудження в ньому можна уявити як послідовне перевипромінювання частинками у відповідності з класичною електродинамікою [4].

Наше припущення (П 1) полягає в тому, що в просторі, абсолютно вільному від будь-яких частинок, і віртуальних в тому числі, якби такий існував (так званий «математичний вакуум») будь-яке поле, електромагнітне збудження поширюється зі швидкість, величина якої перевищує відому константу C. В такому разі величина швидкості світла у ФВ обумовлена взаємодією електромагнітної хвилі з зарядженими віртуальними частинками, і, як наслідок, уповільненням швидкості її поширення в цьому специфічному діелектрику до величини C (П 2). Друге припущення природнє і нічому не суперечить. Перше - не може бути доведено або спростовано, але корисне для загальної картини. Окрім того, що реальний ФВ складається з короткочасно виникаючих віртуальних частинок, важливо, що рухаються вони з різними швидкостями. Маючи заряд, вони реагують на електромагнітне поле. Їх індивідуальний внесок в перевипромінювання різний і може бути визначений, виходячи з різних якісних моделей, одна з яких розглянута далі.

Хвиля - явище колективне: переміщується, відтворюючись в просторі, деяка монофазна поверхня, яка містить безліч частинок. Припустимо, що хвиля збудження, рухаючись зліва вправо в системі відліку A, досягла площини *1*. В результаті перевипромінювання умовно нерухомими частинками через інтервал часу ΔT збудження виявиться в площині *2*. Однак, в площині *1* є також група частинок з швидкістю $(+/-)V_1$. Перевипромінюючи, ця група створить в площині *2* таку ж хвилю, але з іншою частотою (через ефект Доплера). Таких хвиль в площині *2*, зі зміщеними частотами, внаслідок хаосу швидкостей в площині *1* виявляється безліч, а їх результуючий вплив дорівнює нулю. У перенесенні випромінювання між площинами *1* і *2*, таким чином, беруть участь тільки частинки з нульовою проекцією швидкості на напрямок поширення. Це збудження буде сприйнято всіма частинками площини *2,* але в подальшому в ефективному перевипромінювані знову беруть участь тільки вказані. Передача випромінювання, таким чином, в системі відліку A відбувається лише за участю частинок, що мають нульову проекцію швидкості на напрямок руху хвилі.

Розглянемо процес перевипромінювання в цій же площині *1*, але з позиції іншої, рухомої, системи відліку *Б*. В системі *Б* в тій же площині *1* є своя віртуальна група квазінерухомих в цій системі *Б* частинок. Тепер саме ця група забезпечує стандартне переміщення фронту хвилі в цій системі *Б*. Це означає, що з позиції іншої системи *Б* за це відповідає інша група частинок в тій же площині *1*, і площини *2* в різних системах відліку не співпадають ні в якому просторі, оскільки однозначно залежать від різних груп частинок (хоча площина старту була та сама). Це виключає будь-які осмислені лінійні співвідношення.

Зі сказаного випливає, що в будь-якому досліді вимірюється швидкість світла завжди і тільки у власній системі координат спостерігача.

Принципова відмінність від звичайної кінематики є в тому, що системи відліку, побудовані на базі реальних матеріальних середовищ (що включають засоби генерації і реєстрації світла) і, власне, світло існують в різних світах. В реальному світі збудження завжди локалізовано, а в ФВ існує тільки в русі. Залучення принципу Галілея для швидкостей (платформи і світла) має штучний характер, бо не має логічної та фізичної основ, і, природно, тягне до формальних нелінійностей. Для збудження, що може тільки переноситись і тільки з постійною швидкістю, комбінації з будь-якими іншими рухомими об'єктами є беззмістовними. Подібної помилки припускаються (на щастя, без радикальних наслідків) при обчисленні відношення електричних і гравітаційних сил. Ці сили з різних фізик, їх порівняння безглузде через відсутність спільної бази. Реальні фізичні тіла мають властивість генерувати або поглинати енергію, але поширюється вона в хаосі ФВ, який є іншим світом. Перший постулат спеціальної теорії відносності в частині, що стосується поширення світла, є наслідком зазначених припущень (П 1, П 2), які не суперечать сучасній електродинаміці. Природно, перетворення Лоренца і весь математичний апарат спеціальної теорії відносності залишаються
коли світло виступає в якості діючого агента, але не більш як зручний інструмент переходу з однієї системи в іншу, прийнятий в математичному моделюванні. Разом з тим не можна виключати глибинного зв'язку між ФВ і природою часу, оскільки існування віртуальних пар може впливати на інші процеси (наприклад, рекомбінацю з участю реальних частинок, а середній час існування пари може виявитися природним еталоном часу).

Взаємодія світла з гравітаційними об'єктами

Нагадаємо одну важливу деталь. Ефективно перевипромінюючими частинками є ті, які мають середню по ансамблю швидкість. В розглянутих випадках це був нуль, зважаючи на симетрію хаосу. В системі спостерігача порушити цю симетрію можна внесенням рухомого діелектрика в пучок світла (дослід Фізо) [5]. У цьому випадку світло перевипромінюється також і реальними частинками, і на його швидкість в комбінованому ансамблі можна довільно впливати змінюючи швидкість реальних частинок. Зауважимо, що дослід Фізо з пучком електронів був би більш показовим для демонстрації ролі ФВ. В цьому є аналогія з поширенням звуку в газі. При ненульовій середній швидкості (чи прискоренні) випромінювача (чи середовища) змінюється частота (чи фаза) коливань на детекторі. Аналогічно, світло демонструє дивовижні ефекти взаємодії з гравітацією тому, що заряд локалізований на масивній частинці. Поблизу масивного тіла віртуальні частинки на короткий час отримують гравітаційний імпульс, який не можуть утилізувати з принципових міркувань, і вимушено передають хвилі. Це в результаті проявляється як спотворення фронту (гравітаційна лінза) або частоти, в залежності від геометрії досліду. Наприклад, радіосигнали супутників GPS, досягаючи Землі, підвищують частоту приблизно на 5-6 Гц.

Енергія світлової хвилі.

Енергія, що переноситься хвилею в реальному середовищі, зазвичай міститься в двох компонентах, які залежать від величини (координата) і швидкості (частота) зміщення. Частинки ФВ за визначенням байдужі до координати, в середовищі ФВ відсутня квазіпружна сила. Єдиним явищем, здатним акумулювати (сприйняти і передати) енергію виявляється прискорення заряджених квазічастинок. Насправді процес ускладнюється зворотною дією перевипроміненої хвилі на квазічастинку (променисте тертя), однак, темп руху (частота коливань ν) виявляється єдиним агентом, що є відповідальним за енергію, а величина енергії виражається простою формулою $E = h\nu$, де h необхідна для узгодження одиниць константа. Вона залежить від поки невідомих характеристик ФВ, тобто, від більш фундаментальних елементарних констант, які, поки що не виявлені.

Висновки

У цій моделі відсутнє пояснення однієї традиційної білої плями - чому існуюча в величезному просторі хвиля здатна одномоментно передати всю енергію із величезного простору мікроскопічному об'єкту. Це, скоріш за все, зумовлено невідомими поки що властивостями ФВ, однак безсумнівним фактом є те, що енергія в ФВ існує як хвильове делокалізоване збудження, що одномоментно і точково з'являється і так само зникає. При цьому доцільно розібратися чому принцип Гюйгенса-Френеля справджується в середовищі фізичного вакууму. Наведені міркування дозволяють зробити припущення, що хвильові властивості світла зумовлені поширенням збудження в колективі віртуальних частинок. Властивість ФВ отримувати, повертати енергію завжди локально і одномоментно (як у частинок) зумовило появу омани щодо дуалізму. Природним і логічним виглядає механізм, коли світло випромінюється (і поглинається) при рекомбінації пар, коли один електрон з пари замінюється нееквівалентним по енергії. Подальші напрямки дослідження полягають у формалізації вказаних явищ.

Список використаних джерел

1. MICHELSON, ALBERT A.; MORLEY, EDWARD W. (1887). *On the Relative Motion of the Earth and the Luminiferous Ether.*
of Science. **34** (203): *p.*333–345.
2. WIKIPEDIA, THE FREE ENCYCLOPEDIA *Virtual particle* [Online] Available from: https://en.wikipedia.org/wiki/Virtual_particle [Accessed: 14th May 2018]
3. *Конончук Г. Л.*, Терентьєва Ю. Г. ПРО ШВИДКІСТЬ СВІТЛА – ЩЕ РАЗ/ Г. Л. Конончук, Ю. Г. Терентьєва // Наукові записки НаУКМА Серія фізико-математичні науки. – 2009. – том 87. - С.36-38.
4. *Ландау Л. Д.*, Лифшиц Е. М. Теорети- ческая физика: Учеб. пособие. В 10 т. Т. II Теория поля. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц // М.: Наука, 1988.
5. *Fizeau, H. (1851). "Sur les hypothèses relatives à l'éther lumineux". Comptes Rendus. **33**: 349–355.*

References

1. MICHELSON, ALBERT A.; MORLEY, EDWARD W. (1887). On the Relative Motion of the Earth and the Luminiferous Ether. *American Journal of Science.* **34** (203): *p.*333–345.
2. WIKIPEDIA, THE FREE ENCYCLOPEDIA *Virtual particle* [Online] Available from: https://en.wikipedia.org/wiki/Virtual_particle [Accessed: 14th May 2018]
3. KONONCHUK G., TERENTYEVA YU. (2009) Once again – about velocity of light *Scientific papers of NaUKMA Phys.-math. Series.* 87. p.36-38.
4. LANDAU, L.D., LIFSHITCH, E.M. (1988) *Teoretical physics.* V. 2. *Field theory* M.: Nauka.
5. FIZEAU, H. (1851) Sur les hypothèses relatives à l'éther lumineux. *Comptes Rendus.* 33. p.349–355.

Надійшла до редколегії 15.06.2018

УДК 535.012.

Кудрявцев Ю. В.[1], д.ф.-м.н., проф.,
Ляшенко І. О.[2], інж.,
Поперенко Л. В. [3], д.ф.-м.н., проф.,
Щербаков А. О.[4], студ.

Оптичні властивості і плазмонний резонанс в метало-діелектричних гетероструктурах з поверхневим шаром графену

[1]Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України, 03142, м. Київ, бульвар Академіка Вернадського, 36
[2,3,4]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail:[4] plv@univ.kiev.ua,
[4] andre.shcherbakov@gmail.com

Yu. V. Kudriavtsev[1], Dr. Sci., Prof.,
I. O. Liashenko[2], eng.,
L.V. Poperenko[3], Dr. Sci., Prof.,
A. O. Shcherbakov[4], stud.

Optical properties and plasmonic resonance in metal-dielectric heterostructures with surface graphene layer

[1]G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of The N.A.S. of Ukraine, 03142, Kyiv, 36 Academician Vernadsky Boulevard
[2,3,4]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail:[4] plv@univ.kiev.ua,
[4] andre.shcherbakov@gmail.com

Методами рефлектометрії Кретчмана-Ретера в ATR-геометрії і багатокутової спектроеліпсометрії виміряно коефіцієнти відбиття і азимути відновленої лінійної поляризації для різних кутів падіння світла на зразки шаруватих структур на склі «хром-БМ-оксид гафнію-графен» (благородний метал БМ=Cu, Ag чи Au). Обраховано у наближенні напівнескінченного середовища для плівок «хром-БМ» оптичні сталі: показники заломлення та поглинання, а також оптичну провідність і дійсну частину діелектричної проникності для різних довжин хвилі світла. В таких гетероструктурах на основі шарів БМ зафіксовано у видимому діапазоні довжин хвиль ефект плазмонного збудження і визначено найсприятливіші для БМ = Ag, Cu умови функціонування таких гетероструктур як оптичних сенсорів в своєрідних координатах «довжина хвилі світла зондового пучка -кут його падіння на шарувату структуру».

Ключові слова: рефлектометрія, p-поляризоване світло, багатокутова спектроеліпсометрія, плазмонне збудження, мідь, срібло, золото, графен.

The coefficients of reflection and azimuths of the restored linear polarization were measured by methods of reflectometry by Kretchmanm-Raether in ATR-configuration as well as multi-angular spectroellipsometry for different angles of incidence on the samples of heterostructures “chrome-noble metal (NM)-hafnia oxide-graphene“ (NM = Cu, Ag or Au). The optical constants namely indexes of refraction and absorption of films “chrome- NM” were also calculated for different wavelengths of light in the approximation of semi-infinite area. The plasmon excitation effect was observed in these NM-based heterostructures in the range of the visible and the most favorable condition for NM=Cu, Ag heterostructures as for optical sensors area was determined in so-called arbitrary coordinates “light wavelength of probing light beam – its angle of incidence on the heterostructure”.

Key Words: reflectometry, p-polarized light, multi-angular spectroellipsometry, plasmon excitation, copper, silver, gold, graphene.

Статтю представив д.ф.-м.н., проф. Макара В.А.

Вступ

Оптичні властивості метало-діелектричних гетероструктур типу «діелектрик (підкладка) - металевий шар (буфер) – власне функціональний базовий шар благородного металу - оксид перехідного металу (протектор від окислення) - зовнішній шар (графен) і їхній взаємозв'язок з електронною структурою вивчались в роботі [1]. В роботі [2] проведено також порівняння спектрів еліпсометричного параметра Ψ (λ) для гетероструктур на базі мідної плівки, яка покрита або графеном, або двома шарами: діелектричною плівкою HfO_2 та графеном. В цій роботі показано, що чутливість сенсора, створеного на основі останнього із зазначених зразків, суттєво зростає як по вибору довжини хвилі λ світла , так і кута падіння φ світла на зразок: оптимум плазмонного ефекту в певному розумінні із обмеженої області в своєрідних координатах (λ ,φ) перетворюються в більш розширену форму в таких координатах. Але специфіка цих властивостей , яка пов'язана із плазмовим збудженням в електронній підсистемі такого структурованого матеріалу за наявності в поверхневому шарі графена, ще не до кінця з'ясована в зв'язку з можливістю використання зазначеного типу гетероструктури в якості сенсорів при діагностиці середовищ методами плазмоніки. Тому метою роботи стало визначення оптимальних умов спостереження плазмового резонансу в покритих шаром оксиду та/чи графена метало-діелектричних структурах, базовим матеріалом в яких вибрано одного із елементів групи благородних металів, що знаходяться в кінцях 3d- (мідь), 4d- (срібло) і 5d- (золото) рядів таблиці Менделеєва, як і порівняльний аналіз отриманих для кожного з них експериментальних результатів.

Екпериментальна частина

У даній роботі були використані наступні зразки:

Зразок №1:
Cr(1.5нм)_Ag(53 нм)

Зразок №2:
Cr(1.5нм)_Ag(53 нм)_Graphene

Зразок №3:
Cr(1.5нм)_Ag(45 нм)_HfO_2(7 нм)

Зразок№4:
Cr(1.5нм)_Ag(45 нм)_HfO_2(7 нм)_Graphene

Зразок №5:
Cr(1.5 нм)_Au(47 нм)

Зразок №6:
Cr(1.5 нм)_Cu(43 нм)_HfO_2(7 нм)

Зразок №7:
Cr Ag(43 нм)_HfO_2(7 нм)

Зразок №8:
Cr(1.5 нм)_Au(43 нм)_HfO_2(7 нм)

Зразок №9:
Cr(1.5 нм)_Cu(43 нм)_HfO_2(7 нм)_Graphene

Спектральні вимірювання проведено методами еліпсометрії [3] і рефлектометрії при зондуванні гетероструктури p-поляризованим світлом.

Основою експерименту стала оптична діагностика плазмонного ефекту шляхом використання явища відбивання p-поляризованого світла від сформованої гетеро-структури із плазмонним збудженням і вимірювання спектра коефіцієнта відбиття $R_p(\lambda)$ методом Кретчмана-Ретера в ATR-геометрії. Проведено також вимірювання методом багатокутової спектроеліпсометрії з можливістю визначення 2-х параметрів: азимута відновленої лінійної поляризації Ψ і зсуву фаз Δ між ортогональними компонентами вектора поляризації при різних φ для цих гетероструктур.

Удосконалення в будові зазначеної гетероструктури з використанням базового шару благородного металу виявиться довершеним, коли настане можливість переконатись у тому, що вибір Cu як функціонального матеріалу для металевої плівки в плазмонному сенсорі є також одним із найбільш ефективних при співставних умовах з іншими елементами із кінців трьох d – перехідних рядів. До них слід віднести необхідні товщини шарів і розміри чутливої ділянки осаджених плівок в сенсорі та кількість використаного матеріалу з урахуванням його собівартості, стійкість поверхневого покриття до окислення в повітряній атмосфері, тощо. Для цього необхідно провести експеримент з гетероструктурами, де використані провідні в плазмоніці метали – срібло і золото, і порівняти ці результати з подібними даними, отриманими стосовно міді в роботі [2]. Тому на рисунках 1 і 2 представлено спектри $R_p(\lambda)$ гетероструктур, в котрих базовою є срібна плівка, і на яких або не осаджено графен (рис.1), або утворено покриття з нього (рис. 2). Цікаво, що змінюються суттєво в розширених діапазонах і по λ, і по φ після осадження на срібній плівці тільки оксиду HfO_2 і спектр $R_p(\lambda)$ (рис.3), і спектр еліпсометричного параметра Ψ(λ) (рис.4). Коли ж потім на цій діелектричній плівці додатково нанесено покриття з графена (зразок 4), сформований сенсор у порівнянні із зразком 3 стає більш чутливим до змін кутового положення плазмонного мінімуму при варіації довжини хвилі світла як в спектрах $R_p(\lambda)$ (рис. 5), так і $\Psi(\lambda)$ (рис.6). Виявляється, що для зразка 4 зміна в спектрі $R_p(\lambda)$ (рис.5) кутового положення мінімуму на один градус досягається в майже вдвічі вужчому інтервалі довжин хвиль. За рахунок цього підвищиться ефективність дії сенсора, верхнім шаром якого слугуватиме графен.

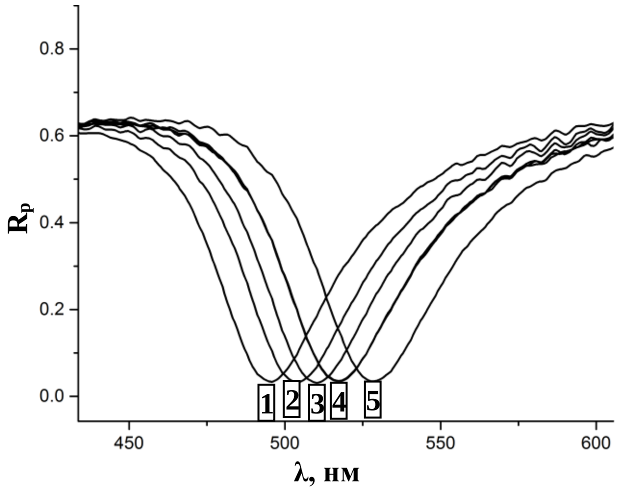


Рис.1. Залежності коефіцієнта відбиття p-поляризованого світла від довжини хвилі (нм) для зразка 1 при різних кутах падіння. Криві: 1, 2, 3, 4, 5 відповідають кутам падіння: 48°, 47,7°, 47,5°, 47,3°, 47°.

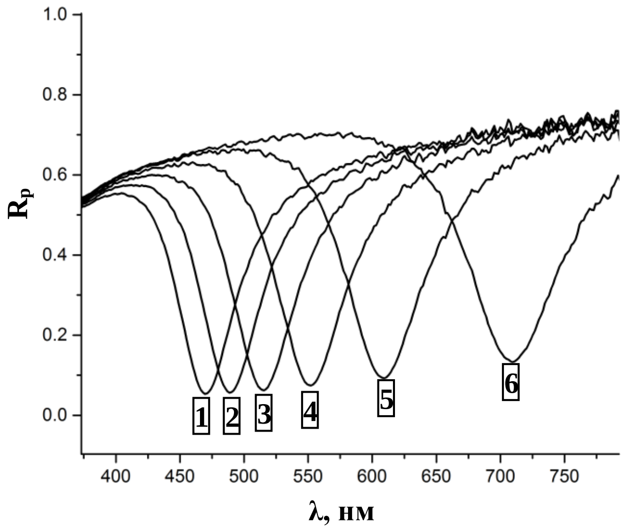


Рис.2. Залежності коефіцієнта відбиття p-поляризованого світла від довжини хвилі (нм) для зразка 2 при різних кутах падіння.
Криві: 1, 2, 3, 4, 5, 6 відповідають кутам падіння: 50°, 49°, 48°, 47°, 46°, 45°.

Слід підкреслити, що при певних товщинах осадженого срібла (d=53 нм, рисунки 1 і 2, та 45 нм, рисунки 3 і 4, відповідно) і використанні графена в таких гетероструктурах плазмонний ефект зростає сильніше, ніж у випадку використання міді (зразок 6 у нашій роботі [2]). Проте, за менших товщин (d=43,5 нм) плівки міді (як матеріала більш дешевого у порівнянні з іншими благородними металами), додатково покритої лише оксидом гафнія, сенсор не уступатиме по чутливості і за λ, і за φ при використанні в плазмониці для аналітичних вимірювань і діагностики об'єктів за умов більш широкого масштабу їх проведення (зразок 7 у роботі [2]).

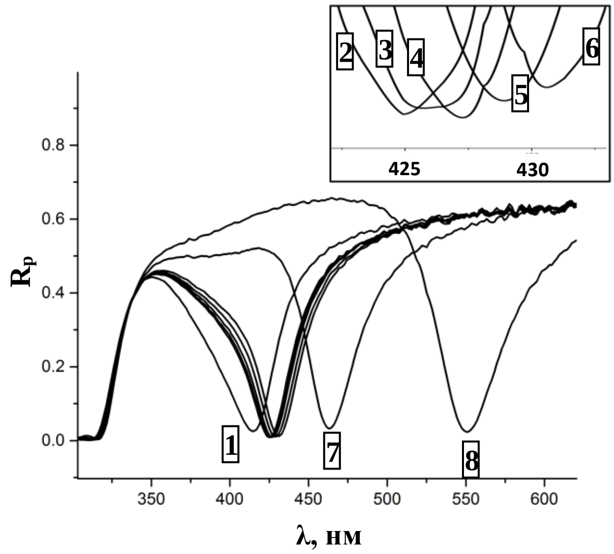


Рис.3. Залежності коефіцієнта відбиття p-поляризованого світла від довжини хвилі (нм) для зразка 3 при різних кутах падіння. Криві: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 відповідають кутам падіння:
60°, 56,5°, 56,3°, 56°, 55,5°, 55°, 50°, 45°.

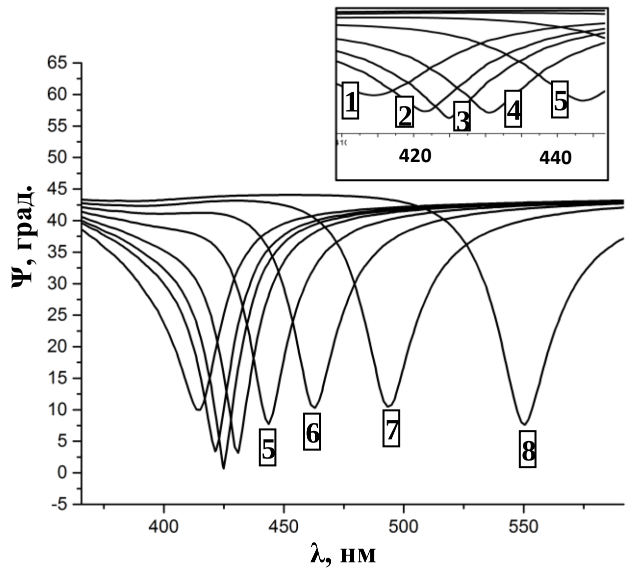


Рис.4. Залежності кута відновленої лінійної поляризації в градусах від довжини хвилі (нм) для зразка 3 при різних кутах падіння. Криві: 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 відповідають кутам падіння:
60°, 57,5°, 56,5°, 55°, 52,5°, 50°, 47,5°, 45°.

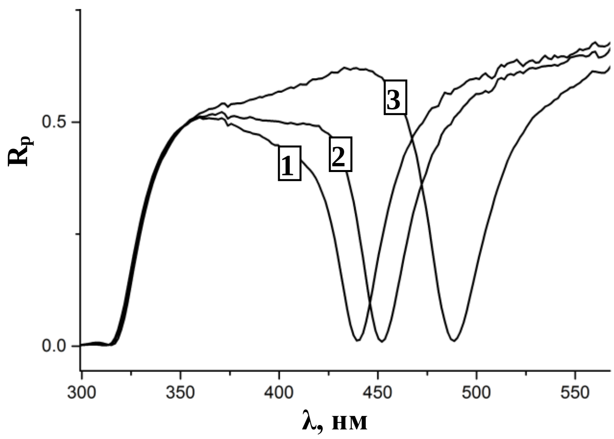


Рис. 5. Залежності коефіцієнта відбиття p-поляризованого світла від довжини хвилі (нм) для зразка 4 при різних кутах падіння. Криві: 1, 2, 3 відповідають кутам падіння: 60°, 56°, 50°.

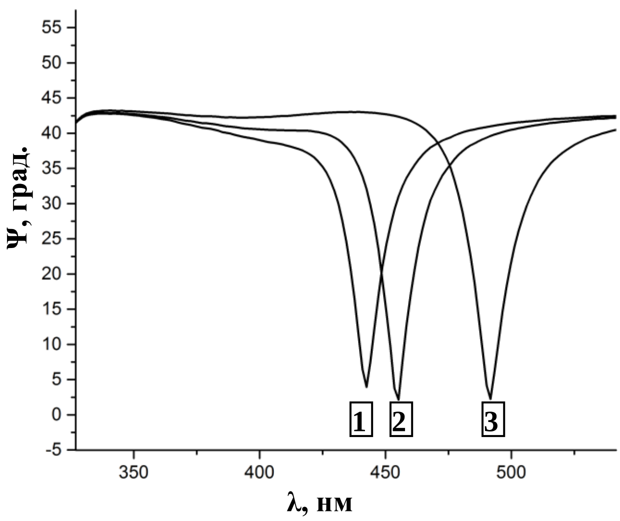


Рис. 6. Залежності кута відновленої лінійної поляризації в градусах від довжини хвилі (нм) для зразка 4 при різних кутах падіння Криві: 1, 2, 3 відповідають кутам падіння: 60°, 56°, 50°.

Більше того, проведений нами еліпсометричний експеримент переконливо показав, що використання такого типового в плазмонці матеріалу як золото в плівковій металевій підсистемі гетеростуктури при підвищених товщинах (d=47 нм) не призведе до підвищення чутливості відповідного сенсора (рис.7). Із рис.7 видно, що і діапазон чутливості за зміни значень φ і λ стосовно плазмонного мінімуму, і власне його глибина у цьому випадку різко зменшується.

Важливо було визначити в наближенні напівнескінченного середовища і за безпосередніми спектрами оптичних сталих n і κ, та дійсної частини діелектричної проникності і оптичної провідності (рис.8), обчислених для гетеростуктур, які вміщували шари кінцевих d-елементів 3-5 рядів таблиці Менделєєва: Cu, Ag і Au, якими саме є характерні області міжзонного та плазмонного поглинання. Із рис.8 видно, що інтенсивне міжзонне поглинання в сформованих гетероструктурах, як і в хімічно чистих благородних металах, починається при енергіях фотонів 2 еВ і вище.

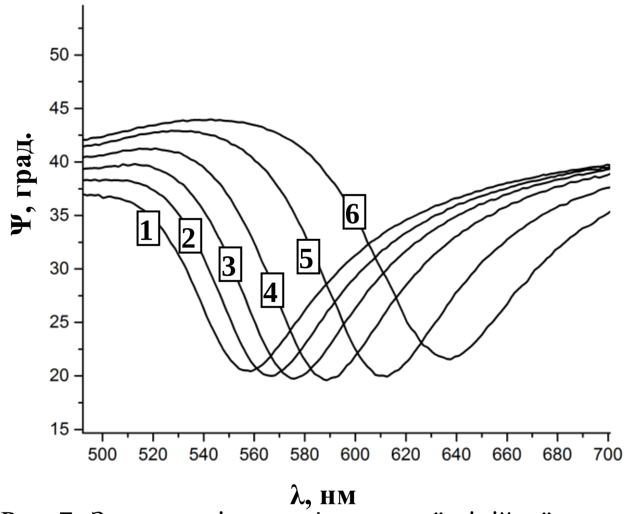


Рис. 7. Залежності кута відновленої лінійної поляризації в градусах від довжини хвилі (нм) для зразка 5 при різних кутах падіння. Криві: 1, 2, 3, 4, 5, 6 відповідають кутам падіння: 52°, 51°, 50°, 49°, 48°, 47°.

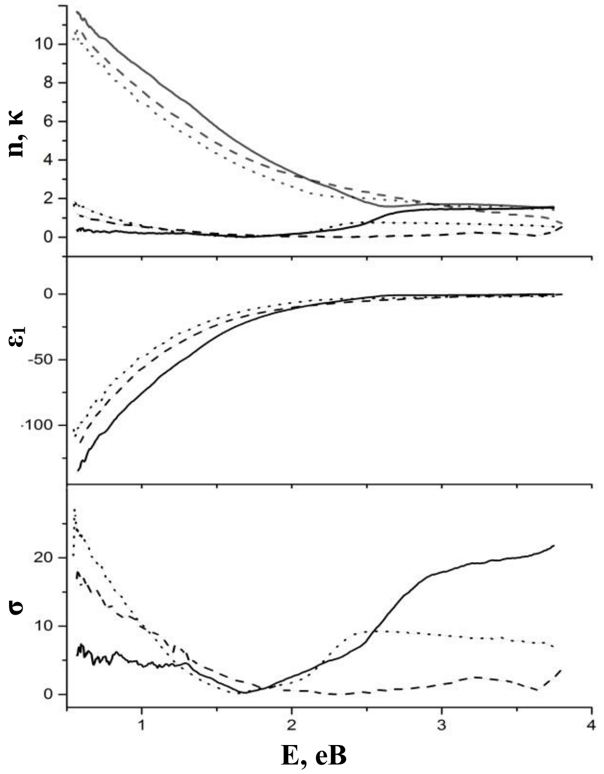


Рис. 8. Оптичні сталі n і κ, дійсної частина діелектричної проникності ε_1 та оптична провідність σ гетероструктур з шарами Cu (зразок 6, пунктирні криві) , Ag (зразок 7, штриховані криві) і Au (зразок 8, цільні криві), отримані на основі еліпсометричних даних.

Порівняння ж отриманих на основі еліпсометричних вимірювань оптичних спектрів для гетероструктур, що базуються, перш за все, на металевому шарі із міді, покритому діелектриком HfO_2, як і додатково - шаром графену на такій діелектричний плівці (рис. 9), показує, що притаманні хімічно чистій міді смуги міжзонного поглинання чітко проявляються в спектрах оптичної провідності обох гетероструктур (зразки 6 і 9). В той же час саме у видимій області, де значний вклад в поглинання дає плазмонне збудження, в зразку 9 помітна особливість у вигляді широкого максимума при енергіях фотонів 1,0 - 1,5 еВ. Порівняно з оптичною провідністю гетероструктури без графену (зразок 6) σ шаруватої системи з графеном (зразок 9) суттєво спадає в ближній інфрачервоній області (рис. 9).

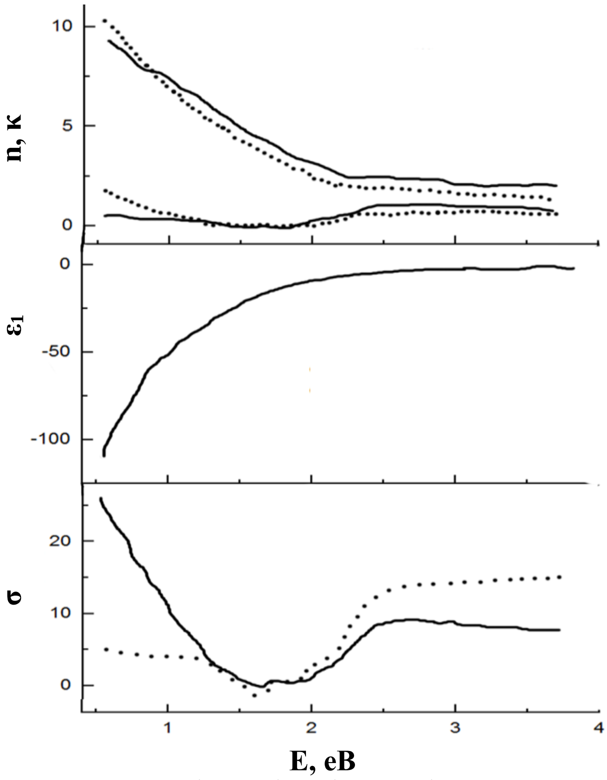


Рис. 9. Оптичні сталі n і к, дійсної частина діелектричної проникності ε_1 та оптична провідність σ гетероструктур з шарами Cu з графеном (зразок 9, пунктирні криві) та без графену (зразок 6, суцільні криві), отримані на основі еліпсометричних даних.

В рамках теорії Друде вільних електронів [4, 5] за розрахованими спектральними залежностями відповідних відношень дійсної і уявної частин діелектричної проникності через так звані діаграми Арганда визначено плазмові ω та релаксаційні γ частоти носіїв заряду гетероструктур (зразки 7 і 8) з металевими базовими шарами Ag (рис. 10) і Au (рис. 11). Розраховані величини цих частот близькі до тих, що притаманні зазначеним благородним металам в масивних зразках цих металів.

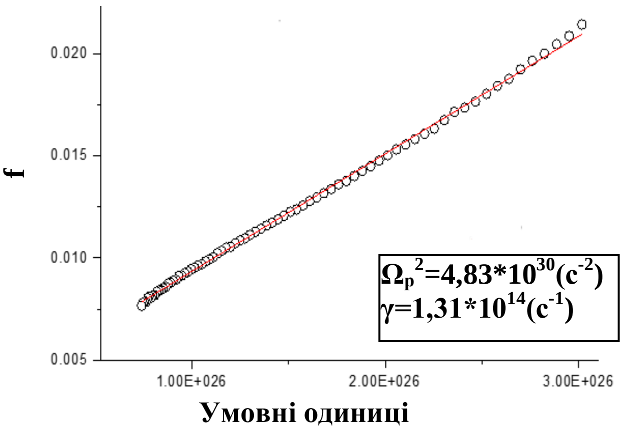


Рис. 10 Діаграма Арганда для зразка 7.

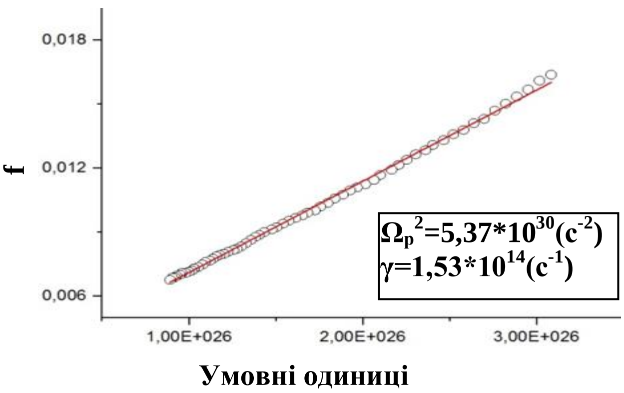


Рис. 11 Діаграма Арганда для зразка 8.

Висновки

Таким чином, покриті графеном плівки срібла і міді, що входять до складу основного шару метало-діелектричних гетероструктур типу «діелектрик (підкладка) - металевий шар (буфер: хром) – власне функціональний базовий шар благородного металу (Cu, Ag чи Au) - оксид перехідного металу (протектор від окислення: оксид гафнію)-зовнішній шар (графен)», при їх використанні в якості сенсорів є цілком спроможною альтернативою традиційним дорогоцінним металам (зазвичай золото) для застосування у плазмоніці. Зазначені гетероструктури є відносно дешеві, стабільні за своєю атомною будовою, а також відтворювані за своїми оптоелектронними характеристиками. Такі високоякісні плазмонні матеріали стануть також придатними для широкого нановиробництва. Більше того, покриті лише оксидом гафнію шари міді чи срібла в якості сенсорів також придатні для відповідних застосувань, бо володіють низькими плазмонними втратами.

Список використаних джерел

1.Оптичні властивості метало- діелектричних структур з поверхневим шаром графену / [В. Г. Кравець, Ю. В. Кудрявцев, І. О. Ляшенко та ін.]. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Серія фізико-математичні науки. – 2017. – №3. – с. 287.

2. Підсилення плазмонного резонансу в метало-діелектричних гетероструктурах з поверхневим шаром графена / В. Г.Кравець, І. О. Ляшенко, Л. В. Поперенко, А. О. Щербаков. // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Серія фізико-математичні науки. – 2018. – №1.

3. Поперенко Л. В. Прецизійні пристрої і прилади оптотехніки / Л. В. Поперенко, В. С. Стащук, І. А. Шайкевич. – Київ: ВПЦ "Київський університет", 2015. – 712 с.

4. Палік Е. Д. Довідник з оптичних констант твердих тіл / Е. Д. Палік., 1998. – 1088 с.

5. Бартоло Б. Д. Колективні збудження у твердому тілі / Бартоло Б. Д., Данко Д. – Нью Йорк: Пленум Прес, 1983. – 113 с.

References

1. V.G. KRAVETS, YU. V. KUDRIAVTSEV, I.O. LIASHENKO and others (2017) Optical properties of metal-dielectric structures with surface graphene layer, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics*, 3.

2. V.G. KRAVETS, I.O. LIASHENKO, L.V. POPERENKO, A. O. SHCHERBAKOV (2018) Amplification of plasmon resonance in metal-dielectric hetero-structures with graphene surface layer, *Bulletin of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Series Physics & Mathematics*, 1.

3. L. V. POPERENKO, V. S. STASHCHUK, I. A. SHAYKEVYCH, (2015) *Precision devices and optoelectronic devices.* VPC "Kyiv University".

4. E. D. PALIK, (1998) *Handbook of optical constants of solids.* Academic Press.

5. B. D. BARTOLO, J. DANKO (1983) *Collective Excitations in Solids.* Plenum Press.

Надійшла до редколегії 25.06.18

УДК 535.016, 535.137

Макаренко О.В.[1], к.ф.-м.н., доц.,
Ямпольський А.Л.[1], асп.,
Завалістий О.І.[1], студ.

Еліпсометрія та моделювання тонких окислених плівок Mo й Ti

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13
e-mail: almakar@univ.kiev.ua

O.V. Makarenko[1], PhD.,
A.L. Yampolskiy[1], PhD stud.,
O.I. Zavalistyi[1], stud.

Ellipsometry and modeling of thin oxidized Mo and Ti films

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13
e-mail: almakar@univ.kiev.ua

Проведено кутові еліпсометричні дослідження тонких окислених плівок молібдену й титану, одержаних за допомогою електронного вакуумного напилення на скляну поверхню. Застосовано теоретичну модель багатошарової структури, що базується на матричному методі розрахунку проходження світла. Показано, що такі металеві плівки мають шари відповідних оксидів (MoO_3 й TiO_2) з обох боків. Товщина нижнього адгезивного шару поблизу границі з підкладкою не перевищує 2 нм. У випадку малого часу напилення металеві плівки мають неоднорідну (порувату або острівцеву) структуру, що призводить до більш складного розподілу окислів. Теоретична модель при цьому дає ефективні значення товщин шарів, які значно відрізняються від реальних. Але, маючи додаткові експериментальні дані, описаний спосіб дослідження можна використати для контролю однорідності напилюваних молібденових і титанових плівок.

Ключові слова: еліпсометрія, молібден, титан, оксид, тонкі плівки, вакуумне напилення.

In this paper, the angular ellipsometric studies of thin oxidized films of molybdenum and titanium, obtained by electronic vacuum deposition on a glass surface, are carried out. The mean wavelength of light during the investigation was λ = 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 obtained. To describe them, the theoretical model of a multilayer structure based on the matrix method has been applied. It is shown that such metallic films have layers of corresponding oxides (MoO3 and TiO2) on both sides. The thickness of the bottom adhesive layer near the border with the substrate does not exceed 2 nm. When further contact with the atmosphere, the origin of these layers growing depends on the homogeneity of the formed film. In the case of small deposition time, metal films have a heterogeneous (porous or islet) structure, which leads to a more complicated distribution of oxides. The theoretical model in this case gives the effective values of the thickness of the layers, which are significantly different from the real ones. However, with additional experimental data for relatively thick films, the described method of study can be used to control the homogeneity of deposited molybdenum and titanium films.

Key words: ellipsometry, molybdenum, titanium, oxide, thin films, electron vacuum deposition.

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

Вступ

Тонкі плівки молібдену й титану, а також їх оксидів – об’єкти для наукових досліджень, що не втрачають актуальності й по сьогодні та мають широке практичне застосування. Завдяки досить рівномірному спектру пропускання у видимому діапазоні титанові плівки товщиною 10…33 нм можна використовувати як нейтральні світлофільтри [1]. Молібденові плівки з оксидом відзначаються зносостійкістю і застосовуються в аерокосмічній промисловості [2]. Тонкі шари оксиду TiO_2 застосовують з фотокаталітичною метою [3] і в газових сенсорах [4]. Що ж до плівок оксиду MoO_3, даний матеріал привертає увагу для виготовлення катодів у літієвих мікробатареях [5] та застосування в електрохромних пристроях [6] завдяки своїм особливим оптичним властивостям.

Однією з найпоширеніших технологій одержання тонких плівок цих матеріалів є метод вакуумного напилення, коли з матеріалу, який бажають напилити, роблять мішень і бомбардують її з електронної гармати у спеціальній камері з високим вакуумом. Під дією електронів відбувається інтенсивне локальне нагрівання та випаровування матеріалу мішені з подальшою його конденсацією на цільовому об'єкті і утворенням плівки [7].

Утворення металевої плівки не буде єдиним результатом напилення. Навіть після відкачування повітря до 2…6*10^{-6} Торр у камері все ж присутня певна залишкова кількість молекул O_2 та H_2O, внаслідок чого молібден при напиленні схильний до утворення поверхневого оксидного шару [8]. Тому поблизу межі поділу молібдену чи титану з підкладкою утворюється перехідний шар, який містить відповідний оксид [9]. Крім того, після винесення на повітря внаслідок взаємодії з атмосферою поверхня напиленої плівки починає поступово вкриватися шаром окису [10].

Саме тому важливою промисловою задачею є контроль товщини шарів тонких металевих/оксидних плівок. Одним з основних і найбільш вживаним для цього методом є спектральна еліпсометрія [11]. Вона дозволяє визначати оптичні сталі різних провідних і непровідних середовищ, шаруватих структур. Даним методом можна вимірювати товщини плівок у діапазоні 0,1 нм…100 мкм [12]. Максимальна вимірювана товщина обмежена поглинанням матеріалу.

При еліпсометричних вимірюваннях на зразок під певним кутом падає плоско поляризоване світло із заданою певним чином площиною поляризації (найчастіше під 45° до площини падіння). Реєструють відбите або пройдене світло. Еліпсометрія передбачає вимірювання двох основних параметрів ψ і Δ, що відповідають за співвідношення амплітуд та зсув фаз між двома компонентами відбитого або пропущеного світла. Ці параметри містять інформацію про оптичні властивості зразка, однак підхід до їх визначення сильно залежить від системи. В загальному випадку потрібно обґрунтовано обрати модель зразка, параметри якої підбираються до досягнення максимальної відповідності результатів моделювання та експерименту.

У випадку тонких металевих плівок часто виникають складнощі в еліпсометричних вимірюваннях, пов'язані з оптичним поглинанням та неоднорідною структурою плівки [12].

З огляду на особливості процесу електронно-променевого осадження та подальшого окислення молібдену і титану на повітрі, реальні плівки являють собою складні системи і вимагають застосування багатошарових моделей для надійності та повноти контролю їх параметрів. Це веде до збільшення кількості обчислень. Подібні задачі неоднократно вирішувались із застосуванням рекурентних співвідношень Ейрі (наприклад, [10]). *Метою даної роботи є спробувати застосувати для контролю тонких молібденових і титанових плівок кутову еліпсометрію з використанням матричних методів у теоретичній моделі шарів*.

Експериментальна частина

Об'єктами дослідження в даній роботі були тонкі плівки молібдену й титану, нанесені на скляні підкладки методом магнетронного розпилення при постійному струмі. Осадження плівок здійснювалось на установці вакуумного напилення УВН 74 П-3, модифікованій для роботи у режимі магнетронного розпилення металевої мішені в атмосфері аргону. На катод подавався від'ємний потенціал -0,45…-1 кВ відносно робочої камери. Розпилювані катоди були виготовлені з титану марки ВТ-1-0 чистотою 99,9% і молібдену марки МЧ-1 чистотою 99,7%. У попередньо відкачану до $2\cdot10^{-5}$ мм рт. ст. камеру подавався аргон чистотою 99,9% до досягнення тиску $5\cdot10^{-3}$ мм рт. ст. [13]. Після напилення зразки були витримані в атмосфері повітря протягом 9 років.

Були виготовлені дві серії зразків: 3 молібденових і 4 титанових. Підкладками слугували скляні пластини завтовшки близько 1,5 мм з показником заломлення n = 1,51 в червоній області. Оскільки безпосередній контроль товщини осаджуваної плівки в процесі напилення на даній установці відсутній, то для кращої репрезентативності було виміряно коефіцієнти пропускання *T* кожного зразка при λ = 625 нм на час нашого дослідження. Детальніша інформація про зразки наведена у *Таблиці 2* і *Таблиці 3*. Варто відзначити, що через неоднорідність плівок коефіцієнт пропускання змінювався від точки до точки приблизно в межах 6% від середнього значення для кожного зразка.

Проводили кутові еліпсометричні дослідження даних зразків за допомогою автоматизованої гоніополяриметричної установки. Схема експерименту зображена на *Рис. 1*. Джерелом випромінювання *Дж* є світлодіод із λ = 625 нм, Δλ = 10 нм. Коліматорний об'єктив *Кол* формує паралельний пучок світла, який далі проходить через поляризатор *П* і падає на зразок *Зр* (зі сторони металевої плівки) під кутом θ. Після відбивання від зразка світло проходить через аналізатор *А* і фокусується камерним об'єктивом *Кам* на чутливу площадку фотоприймача *ФП* (фотодіода).

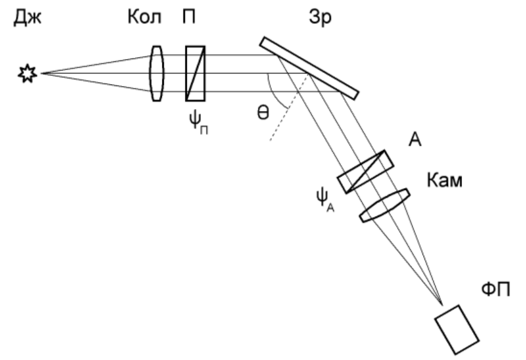


Рис. 1. Схема експерименту. *Дж* – джерело випромінювання, *Кол* – коліматорний об'єктив, *П* – поляризатор, *Зр* – зразок, *А* – аналізатор, *Кам* камерний об'єктив, *ФП* – фотоприймач.

На початку експерименту поляризатор *П* встановлюється під кутом $\psi_П = 45°$ до p-площини, щоб вирівняти інтенсивності p- та s-компонент падаючого випромінювання. Далі відбувається покрокове сканування обраного діапазону кутів падіння θ, під час якого для кожного θ реєструється інтенсивність відбитого світла при обертанні аналізатора $I_{вих}(\psi_A)$. За цими даними в режимі реального часу обраховуються кутові залежності еліпсометричних параметрів ψ(θ) і Δ(θ).

Теоретична модель

Для розрахунку азимута ψ відновленої лінійної поляризації та зсуву фаз Δ між p- і s-компонентами пройденого через зразки світла нами проводилось моделювання проходження світла крізь багатошарову плівкову систему з використанням електромагнітної теорії, описаної в [14]. Визначення відбивання, пропускання та поглинання такої системи з точки зору електромагнітної теорії зводиться до вирішення граничної задачі, тобто визначення стаціонарних амплітуд векторів напруженостей електричного і магнітного полів на всіх границях багатошарової системи з врахуванням інтерференційних явищ при падінні світлової хвилі з певними характеристиками. Всі енергетичні співвідношення і фазові зміни в кінцевому рахунку виражаються через вектори поля.

Наближено припускаємо, що падаюче світло описується плоскою хвилею (лінійно поляризоване, монохроматичне і має нескінченно широкий переріз пучка). Також припускаємо, що досліджувана тонкоплівкова структура складається з нескінченно широких плоскопаралельних шарів, однорідних та ізотропних. Тоді оптичні властивості кожного шару повністю описуються комплексним показником заломлення $N_j = n_j - ik_j$ і геометричною товщиною d_j. Нумерацію обираємо з верхнього оксидного шару: верхній шар – 1, метал – 2, нижній адгезійний шар – 3, скляна підкладка – 4.

Спочатку за наведеними в [14] рекурентними формулами, які зручно записувати у вигляді матричних рівнянь, розраховуються комплексні вектори напруженості на межах середовищ. В результаті коефіцієнт відбивання та зміна фази електричної хвилі при цьому визначаються наступним чином:

$$R = \left|\frac{E_{0^-}^{(r)}}{E_{0^-}^{(t)}}\right|^2 \tag{1}$$

$$\rho = arg\left[\frac{E_{0^-}^{(r)}}{E_{0^-}^{(t)}}\right], \tag{2}$$

де $E_{0^-}^{(t)}$ та $E_{0^-}^{(r)}$ – це амплітуди падаючої на межу поділу між повітрям і першим середовищем багатошарової структури хвилі та відбитої від цієї межі хвилі відповідно.

Щоб дістати еліпсометричні параметри ψ і Δ, потрібно провести такі розрахунки для p- та s-хвиль. Тоді

$$\psi = arctg\left(\left|\frac{\left(E_{0^-}^{(r)}\right)_p}{\left(E_{0^-}^{(r)}\right)_s}\right|\right) \tag{3}$$

$$\Delta = \pi - \left|arg\left[\frac{E_{0^-}^{(r)}}{E_{0^-}^{(t)}}\right]\right| \tag{4}$$

Результати та їх обговорення

Для кожного із досліджуваних зразків порівнювали експериментально виміряні й теоретично розраховані залежності ψ(θ) і Δ(θ). При цьому показники заломлення n і поглинання k шарів вважали відомими (*Таблиця 1*), а товщини шарів d_1 … d_3 виступали в якості параметрів, які потрібно підібрати. Критерієм якості підбору слугувало середнє квадратичне відхилення MSE (Mean Squared Error) між теоретичними й експериментальними даними:

$$MSE = w_\psi \cdot \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\left(\psi_{theor}^{j} - \psi_{exp}^{j}\right)^2 + w_\Delta \cdot \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\left(\Delta_{theor}^{j} - \Delta_{exp}^{j}\right)^2 \quad (5)$$

Тут w_ψ та w_Δ – це вагові коефіцієнти, які обирали обернено пропорційними до величини розмаху відповідних кривих на графіках. Також задавали інтервал $\Delta\theta$, в якому обчислюється MSE, так, щоб це була область поблизу псевдоголовного кута зразка, яка містить характерні особливості графіків (мінімум ψ і перехід Δ через 90°).

Таблиця 1

Оптичні властивості матеріалів зразків

Матеріал	n	k
Mo	3,42	3,62
MoO_3	2,09	0,02
Ti	2,46	3,08
TiO_2	2,39	0,00

Таблиця 2

Результати моделювання зразків молібдену

Зразок	$t_{напил.}$	d_1, нм	d_2, нм	d_3, нм	$T_{експ}$
Mo#2	*30 с*	*17,8*	*6,6*	*5e-5*	*0,46*
Mo#3	*45 с*	*10,7*	*8,9*	*9e-3*	*0,32*
Mo#4	*15 с*	*60,9*	*5,0*	*12,8*	*0,88*

Таблиця 3

Результати моделювання зразків титану

Зразок	d_1, нм	d_2, нм	d_3, нм	$T_{експ}$
Ti#1	*45,8*	*13,5*	*20,0*	*0,68*
Ti#2	*8,6*	*12,7*	*1e-4*	*0,37*
Ti#3	*6,7*	*22,8*	*3e-3*	*0,19*
Ti#4	*2,3*	*35,8*	*7e-3*	*0,10*

Типові результати вимірювань, а також теоретичні криві, одержані матричним методом, зображені на *Рис. 2.* Аналогічним чином були підібрані параметри товщин шарів d_1 … d_3 для решти зразків. Згідно з [15], для молібденових зразків верхній шар 1 складається, в основному, з оксиду молібдену MoO_3, а нижній шар 3 – теж з оксиду MoO_3 і, можливо, інших сполук. Для титанових зразків це переважно оксид TiO_2. Тому для розрахунків нами були обрані саме ці сполуки. Результати підбору товщин для всіх зразків зведені в *Таблиці 2* і *Таблиці 3*. У цих же таблицях вказано виміряні коефіцієнти пропускання *T* зразків при нормальному падінні випромінювання на їх поверхню.

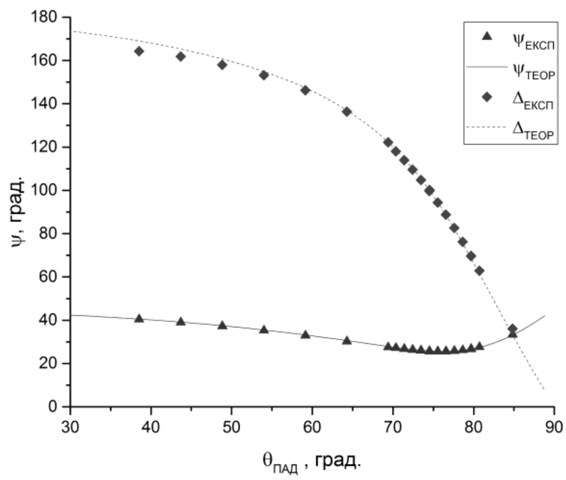


Рис. 2. Кутові залежності еліпсометричних параметрів ψ та Δ для зразка Ti#4. Точки – експериментальні дані, лінії – теоретичні розрахунки.

Видно, що для великих коефіцієнтів пропускання *T*, яким відповідає найменша кількість напиленого металу, виходять найбільші значення товщин оксидних шарів d_1 і d_3. При зменшенні коефіцієнта пропускання *T*, або, іншими словами, зростанні кількості напиленого металу, ці товщини зменшуються як за абсолютною величиною, так і відносно товщини не окисненого металевого шару d_2. Це можна пояснити наступним чином. При невеликому часі напилення метал осідає на підкладку нерівномірно, утворюючи острівцеві структури. Такі металеві острівці обростають шаром окису з усіх боків, відрізняються лише вищеописані механізми окислення для області, що контактує з підкладкою, і вільної поверхні. Тому тришарова модель для відповідних зразків дає найбільші значення d_1 і d_3. Якщо процес напилення проводити довше, настає поріг перколяції і острівці починають зливатися між собою. Така структура є менш вразливою, вона відкрита до окиснення переважно згори. Нарешті, при тривалому напиленні утворюється відносно однорідний і неперервний шар металу, у якого верхня й нижня оксидні оболонки розділені між собою. Оскільки площа поверхні, що контактує з атмосферою, в даному випадку найменша, а доступ до границі з підкладкою практично відсутній, маємо найменші товщини оксидних шарів d_1 і d_3.

Якщо підрахувати суму товщин $d_1+d_2+d_3$, то побачимо, що у зразків з найменшим часом напилення (і найбільшим коефіцієнтом пропускання) вона максимальна. Таке незрозуміле на перший погляд протиріччя пояснюється саме неоднорідністю утворюваних плівок. Спроба застосувати матричний метод до окислених острівців з повітряними проміжками між ними дає ефективні значення d_1 … d_3, які значно відрізняються від реальних. Тому даний підхід до контролю товщин металевих окислених плівок є найбільш застосовним до об'єктів, у яких ці плівки мають однорідну структуру.

Можна визначити типові товщини оксидних шарів d_1 і d_3 для свіжовиготовлених за певним технологічним процесом молібденових чи титанових плівок (досить товстих, щоб бути напевно однорідними). Тоді це дасть змогу оцінювати однорідність і тонших вирощуваних з цих металів за даним процесом плівок, d_1 і d_3 з типовими значеннями.

Наостанок зазначимо, що варіювання товщини адгезивного шару d_3 в межах від 0 до 2 нм практично не змінює картину залежностей $\psi(\theta)$ і $\Delta(\theta)$. Тому його товщину можна оцінити як таку, що не перевищує 2 нм.

Висновки

Підводячи підсумки даної роботи, можна сказати наступне. Під час вакуумного напилення молібденових і титанових плівок на них уже з'являються шари окису. При подальшому контакті з атмосферою характер розростання цих шарів залежить від однорідності утвореної плівки. Товщину адгезивного оксидного шару d_3 можна оцінити меншою, ніж 2 нм.

Застосовність матричного методу для контролю товщин описаних структур обмежується їх поруватістю і переходом до острівцевого типу при невеликих кількостях напиленого металу. Маючи додаткові експериментальні дані, за величинами еліпсометрично виміряних товщин оксидних шарів можна оцінювати якість та структуру плівок Mo й Ti.

Список використаної літератури

1. G. Hass & A. P Bradford. Optical Properties and Oxidation of Evaporated Titanium Films*. *Journal of the Optical Society of America*, 47(2), 125 (1957).
2. S. Sampath, F. Wayne *J. Therm. Spray* 3, S.282 (1994).
3. E. Aubry, P. Miska, L. Gigleux, et al. *Surf. Coat. Technol.* 202 (20), 4980 (2008).
4. S. Boukrouh, R. Bensaha, S. Bourgeois, et al. *Thin Solid Films* 516 (18), 6353 (2008).
5. C. Julien, B. Yebka and J. P. Guesdon. *Ionics* 1, 316 (1995).
6. C. G. Granqvist. *Handbook of Inorganic Electrochromic* Materials. Amsterdam: Elsevier (1995).
7. Z. Wang and Z. Zhang. Electron Beam Evaporation Deposition. In *Advanced Nano Deposition Methods (eds Y. Lin and X. Chen)* (2016).

References

1. HASS G., & BRADFORD A. P. (1957). Optical Properties and Oxidation of Evaporated Titanium Films*. *Journal of the Optical Society of America*, 47(2), 125.
2. SAMPATH S., WAYNE F. (1994) *J. Therm. Spray* 3, S.282.
3. AUBRY E., MISKA P., GIGLEUX L., et al. (2008). *Surf. Coat. Technol.* 202 (20), 4980.
4. BOUKROUH S., BENSAHA R., BOURGEOIS S., et al. (2008). *Thin Solid Films* 516 (18), 6353.
5. JULIEN C., YEBKA B. and GUESDON J. P. (1995) *Ionics* 1, 316.
6. GRANQVIST C. G. (1995) *Handbook of Inorganic Electrochromic* Materials. Amsterdam: Elsevier.
7. WANG, Z. and ZHANG, Z. (2016). Electron Beam Evaporation Deposition. In *Advanced Nano Deposition Methods (eds Y. Lin and X. Chen)*.

8. J. P. Greene, & G. E. Thomas. Electron beam evaporation of molybdenum, yttrium and zirconium targets for heavy-ion nuclear physics. In *15 world conference of the International Nuclear Target Development Society: Special high-purity materials and targets*. Santa Fe, USA: US Govt. Printing Office Dep, 16 p (1990).
9. S.S. Shaikevich B.D. Kostiyk, T.A. Koliesnichenko. Adgeziya i opticheskiye svoystva tonkikh metallicheskikh plenok molibdena i vanadiya, nanesennykh na nemetallicheskiye materialy [Adhesion and optical properties ofthin metal films of molybdenum and vanadium deposited on non-metallic materials]. *Adhesion of melts*. – Kiev: Naukova dumka, 1974, 42-47 (Rus).
10. V.V. Lendel, O.V. Lomakina, L.YU. Mel’nychenko , I.A. Shaikevych. Elipsometrychni vlastyvosti tonkykh plivok molibdenu pry zbudzhenni poverkhnevykh polyarytoniv [Ellipsometric properties of thin molybdenum films in excitement of surface polaritons]. *Metallofizika i noveishiye tekhnologii* – 2014, vol.36, 2, 205-215 (Ukr).
11. *Physics of thin films; advances in research and development. Ed. by* Georg Hass and Rudolph E. Thun. New York and London: Academic Press, vol. 4 (1967).
12. H. Fujiwara. *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications*. Wiley, West Sussex, England (2007).
13. O.V. Lomakina Optical properties of thin Mo, Ti, Cr films and transient layers on them. – Manuscript. Thesis for Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.05 – optics, laser physics. – Taras Shevchenko Kyiv National University of Kyiv, Kyiv, 2010.
14. *Physics of thin films; advances in research and development. Ed. by* Georg Hass. New York and London: Academic Press, vol. 1 (1963).
15. R. Goswami, H. Herman, S. Sampath , et al. Plasma sprayed Mo/Mo oxide nanocomposites: synthesis and characterization. *Surface and Coatings Technology* 141, 220-226 (2001).

8. GREENE J. P., & THOMAS G. E. (1990). Electron beam evaporation of molybdenum, yttrium and zirconium targets for heavy-ion nuclear physics. In *15 world conference of the International Nuclear Target Development Society: Special high-purity materials and targets*. Santa Fe, USA: US Govt. Printing Office Dep, 16 p.
9. SHAIKEVICH S.S., KOSTIYK B.D., KOLIESNICHENKO T.A. (1974) Adgeziya i opticheskiye svoystva tonkikh metallicheskikh plenok molibdena i vanadiya, nanesennykh na nemetallicheskiye materialy [Adhesion and optical properties ofthin metal films of molybdenum and vanadium deposited on non-metallic materials]. *Adhesion of melts*. – Kiev: Naukova dumka, p. 42-47.
10. LENDEL V.V., LOMAKINA O.V., MEL’NYCHENKO L.YU., SHAIKEVYCH I.A. (2014) Elipsometrychni vlastyvosti tonkykh plivok molibdenu pry zbudzhenni poverkhnevykh polyarytoniv [Ellipsometric properties of thin molybdenum films in excitement of surface polaritons]. *Metallofizika i noveishiye tekhnologii.* V.36, 2, 205-215.
11. *Physics of thin films; advances in research and development.* (1967) Ed. by Georg Hass and Rudolph E. Thun. New York and London: Academic Press, vol. 4.
12. FUJIWARA, H. (2007) *Spectroscopic Ellipsometry: Principles and Applications*. Wiley, West Sussex, England.
13. LOMAKINA O.V. (2010) Optical properties of thin Mo, Ti, Cr films and transient layers on them. – Manuscript. Thesis for Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.05 – optics, laser physics. – Taras Shevchenko Kyiv National University of Kyiv.
14. *Physics of thin films; advances in research and development. Ed. by* Georg Hass (1963). New York and London: Academic Press, vol. 1.
15. GOSWAMI R., HERMAN H., SAMPATH S., et al. (2001) Plasma sprayed Mo/Mo oxide nanocomposites: synthesis and characterization. *Surface and Coatings Technology* 141, 220-226.

Надійшла до редколегії 18.06.2018

Ніколаєнко Т. Ю.[1], к.ф.-м.н.

Структура та енергетичні характеристики комплексів молекул з одним водневим зв’язком

[1]Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 01601, м. Київ, вул. Володимирська 64/13,
e-mail: [1]tim_mail@ukr.net

T. Yu. Nikolaienko[1], Ph.D.

The structure and energetic characteristics of molecular complexes bound by a single hydrogen bond

[1]Taras Shevchenko National University of Kyiv, 01601, Kyiv, Volodymyrska st. 64/13,
e-mail: [1]tim_mail@ukr.net

За допомогою неемпіричних методів квантово-механічного комп'ютерного моделювання (зокрема, метод B97-3c теорії функціоналу густини з поправками, які дозволяють, зокрема, коректно описувати дисперсійну міжатомну взаємодію, теорії збурень Мьоллера-Плессета та адаптованої до симетрії теорії збурень (SAPT)) знайдено рівноважні геометрії 1177 різних молекулярних комплексів із двох чотириатомних молекул, стабілізованих одним водневим зв'язком. Проаналізовано статистичні характеристики відстані між атомом водню, задіяним у водневому зв’язку, та акцептором протона, а також взаємозв’язки між геометричними параметрами комплексів та внесками електростатичної, індукційної, дисперсійної та обмінної взаємодій до загальної енергії зв’язування.

Ключові слова: нековалентні взаємодії, водневий зв’язок, набір даних, теорія збурень.

Equilibrium geometries of 1177 different molecular complexes composed of two four-atomic molecules bonded by exactly one hydrogen bond have been obtained using non-empirical methods of computational quantum-mechanical modeling (including B97-3c density functional theory method with integrated dispersion corrections, Moeller–Plesset perturbation theory and symmetry-adapted perturbation theory (SAPT)). Statistical properties were analyzed for the distance $d_{X\ldots H}$ between the hydrogen atom involved in intermolecular bonding and the atom acting as the hydrogen bonding proton acceptor. In addition to that, interrelations between the same distance and the contributions of electrostatic, induction, exchange and dispersion interactions into the total binding energy have been investigated. It has been shown that in the studied complexes the only repulsive contribution is the exchange one, while electrostatic, induction and dispersion interactions are attractive. At the most probable value of $d_{X\ldots H}$ distance of 2.1 Å, the typical value of exchange contribution has been found to be 6.7 kcal/mol, while the average value of the total interaction energy at the same distance is -4.7 kcal/mol.

Key Words: non-covalent interactions, hydrogen bond, dataset, perturbation theory.

Статтю представив акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Булавін Л.А.

Вступ

Розуміння властивостей нековалентних взаємодій, зокрема – водневих зв’язків, є ключовим як у побудові моделей полярних рідин, так і у раціональному дизайні нових біомолекул та інших лігандів з заданими фізичними властивостями, зокрема – здатних селективно зв’язуватися із заданою біологічною мішенню. Хоча на даний час уже був здійснений обмежений поступ у побудові наборів даних, що характеризують властивості нековалентних взаємодії (зокрема, водневих зв’язків), наприклад – набір даних GMTKN30 [1], – але кількість об'єктів, що включені до таких наборів, як правило є замалою для їх використання у виявленні статистичних закономірностей та взаємозв'язків між структурними та енергетичними властивостями молекулярних комплексів. Зокрема, до цього часу відсутні набори великого обсягу даних (декілька сотень комплексів та більше) про комплекси із двох невеликих молекул (так звані бімолекулярні комплекси), які були б стабілізовані рівно одним водневим зв’язком. Відсутність таких даних обмежує побудову фізичних моделей водневого зв’язування, придатних для здійснення кількісних передбачень про властивості окремих водневих зв’язків на підставі параметрів, що можуть бути визначені або з просторового розташування взаємодіючих молекул, або на підставі дескрипторів електронної їх структури, визначених з квантово-хімічних розрахунків.

У даній роботі за допомогою неемпіричних методів квантово-механічного комп'ютерного моделювання значної кількості рівноважних структур бімолекулярних комплексів, стабілізованих водневими зв'язками, досліджено взаємозв'язки між геометричними параметрами комплексів та енергетичними характеристиками комплексів.

Матеріали і методи

Рівноважні геометрії комплексів, стабілізованих водневими зв'язками, одержували в результаті оптимізації геометрії квантово-мезанічним методом B97-3c [2] теорії функціоналу густини з поправками, які дозволяють, зокрема, коректно описувати дисперсійну міжатомну взаємодію, з використанням програмного пакету ORCA версії 4.0.1 [3]. Початкові геометрії комплексів були створені шляхом комбінування чотириатомних молекул з бази PubChemQC [4]. Після оптимізації геометрії з-поміж наборів комплексів, що мали однаковий граф зв'язків, залишали один комплекс (із найменшою енергією). При побудові графу зв'язків враховували як ковалентні, так і нековалентні взаємодії. Зв'язки (зокрема, водневі) ідентифіковували за наявністю лінії зв'язку, визначеної методом QTAIM [5] за розподілом густини електронного заряду, отриманого методом B97-3c. Комплекси, у яких не був наявний водневий зв'язок між молекулами, або була виявлена більше, ніж одна нековалентна взаємодія між молекулами, з подальшого розгляду виключали. Процес побудови підсумкового набору комплексів виконувався в автоматичному режимі з допомогою спеціально розробленої програми.

Використовуючи отримані просторові структури комплексів, було розраховано загальну енергію взаємодії (у ккал/моль, 1 ккал/моль = 4,184 кДж/моль) молекул, що утворюють комплекс, за формулою

$$E^{int} = E_{AB} - E_A - E_B \qquad (1)$$

де E^{int} – енергія взаємодії молекул, E_{AB} – енергія комплексу, E_A – енергія першої молекули комплексу, E_B – енергія другої молекули комплексу. Зазначені енергії включали як енергію електронної підсистеми (розраховану у пакеті Psi4 [6] версії 1.2a1.dev781 методом теорії збурень Мьоллера-Плессета 2-го порядку (MP2) з використанням набору базисних функцій aug-cc-pVQZ), так і енергію кулонівського відштовхування ядер атомів. Розрахунок енергій E_A та E_B здійснювався з використанням того ж набору базисних функцій, що і при розрахунку E_{AB} (використовувався так званий DCBS-базисний набір димера), виключаючи тим самим так звану BSSE-помилку.

Результати та обговорення

У одержаному наборі з 1177 рівноважних структур комплексів двох молекул, сполучених рівно одним водневим зв'язком, найбільшу кількість (1155 комплексів) становлять зв'язки наступних типів: NH...N (486 комплексів), NH...O (279), OH...N (235), OH...O (99), NH...C (36), OH...C (20). Статистичний розподіл воднево-зв'язаних комплексів за відстанню $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та атомом-акцептором протона наведено на рис. 1.

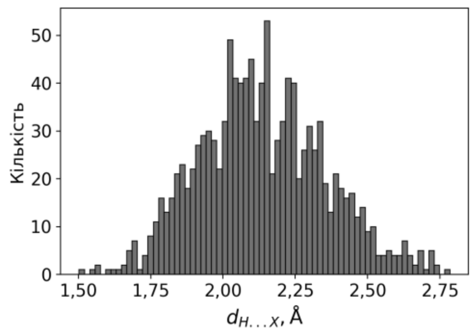


Рис. 1. Розподіл воднево-зв'язаних комплексів за відстанню $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та акцептором протона

Залежність одержаної енергії E^{int} взаємодії молекул воднево-зв'язаного комплексу від відстані $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та атомом-акцептором протона наведена на рис. 2.

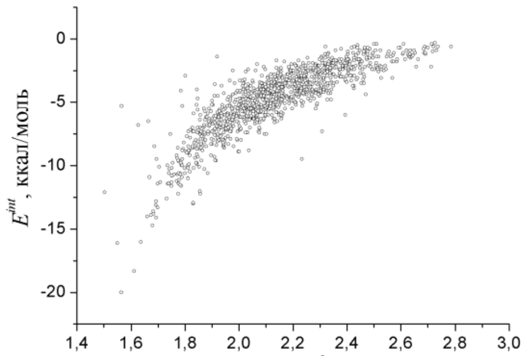


Рис. 2. Залежність енергії E^{int} взаємодії молекул воднево-зв'язаного комплексу від відстані $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та атомом-акцептором протона

З одержаних даних випливає, що енергія взаємодії не є однозначною функцією відстані $d_{H...X}$: при одному і тому ж значенні $d_{H...X}$ значення Eint можуть різнитися на понад 2 ккал/моль.

Окрім згаданого розрахунку енергії взаємодії за супрамолекулярним підходом, для рохрахунку енергії взаємодії молекул комплексу було використано методи адаптованої до симетрії теорії збурень (SAPT) [7]. Перевагою останніх є можливість розділення загальної енергії взаємодії на суму внесків від складових різної фізичної природи (електростатичної, індукційної, обмінної, дисперсійної). Взаємозв'язок між енергіями взаємодії, одержаними методами SAPT та MP2 наведено на рис. 3.

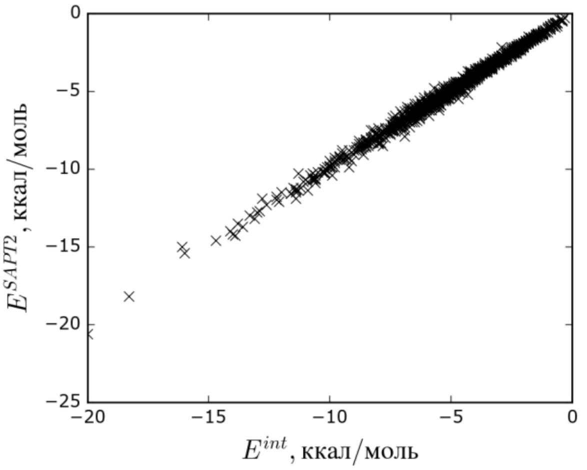


Рис. 3. Взаємозв'язок між величинами енергії взаємодії молекул воднево-зв'язаного комплексу, знайдених супрамолекулярним методом (E^{int}) та з використанням адаптованої до симетрії теорії збурень (E^{SAPT2})

З наведених даних випливає, що одержані методами MP2 та SAPT енергії взаємодії молекул воднево-зв'язаного комплексу корелюють, а середньоквадратичні значення різниць вказаних енергій складають 0,22 ккал/моль для SAPT2. Аналогічна апроксимація для SAPT2+3 дає більше середньоквадратичне відхилення (0,39 ккал/моль), адже метод SAPT2+3 враховує поправки більш високих, аніж методи MP2 та SAPT2, порядків розвиненнях енергії взаємодії в ряди теорій збурень.

Наявна кореляція енергій взаємодії, одержаних різними методами, дає змогу використати SAPT для аналізу внеску різних складових до енергії взаємодії. Залежність розрахованих методом SAPT2+3 електростатичної, індукційної, обмінної, дисперсійної складових до енергії взаємодії E^{SAPT} від відстані відстані $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та атомом-акцептором протона наведена на рис. 4.

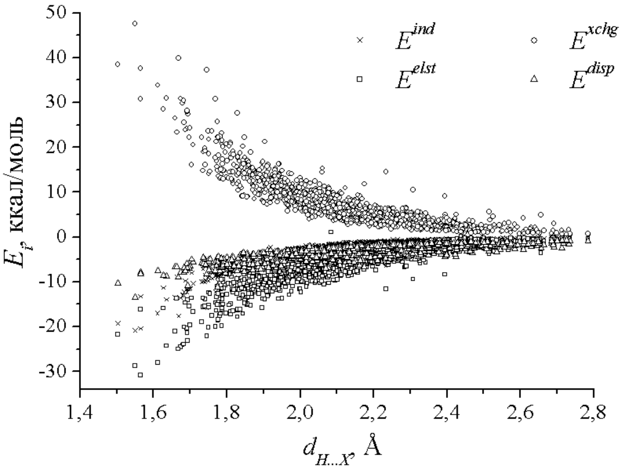


Рис. 4. Залежність внесків електростатичної (E^{elst}), дисперсійної (E^{disp}), іднукційної (E^{ind}) та обмінної (E^{xchg}) взаємодій до загальної егергії взаємодії молекул воднево-зв'язаного комплексу від відстані $d_{H...X}$ між атомом водню, задіяним у водневому зв'язку, та атомом-акцептором протона

З одержаних даних випливає, що з-поміж усіх дсліджених внесків до загальної енергії взаємодії лише внесок E^{ind} індукційної взаємодії виявив наближено однозначну залежність від відстані $d_{H...X}$. Це може свідчити про участь в цьому виді взаємодії лише тих атомів, що безпосередньо задіяні у водневому зв'язуванні, а саме: атома водню та атомів донора та акцептора протона.

Варто зазначити, що різні складові вносять співмірний внесок до загальної енергії взаємодії (яку можна обрати за оцінку для енергії водневого зв'язування), причому електростатичний, індукційний та дисперсійний внески мають стабілізуючий (притягувальний) характер, а обмінний – дестабілізуючий (відштовхувальний). Середнє значення останнього при $d_{H...X}$ = 2,1 Å (найбільш імовірному значенні $d_{H...X}$ – див. рис. 1) складає 6,7 ккал/моль та має середньоквадратичне відхилення 2,1 ккал/моль, тоді як середнє значення загальної енергії взаємодії при тому ж значенні $d_{H...X}$ складає -4,7 ккал/моль і має середньоквадратичне відхилення 1,3 ккал/моль.

Висновки

Таким чином, з використанням квантово-механічних методів молекулярного моделювання було побудовано систематизований набір даних, що містить як рівноважні геометрії 1177 різних молекулярних комплексів, стабілізованих одним водневим зв'язком, так і дані про їхні структурні та енергетичні властивості.

Список використаних джерел

1. *Goerigk L.* Efficient and Accurate Double-Hybrid-Meta-GGA Density Functionals – Evaluation with the Extended GMTKN30 Database for General Main Group Thermochemistry, Kinetics, and Noncovalent Interactions / L. Goerigk, S. Grimme // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2010. – Vol. 7. – p. 291–309.

2. 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.

3. *Neese F.* Software update: the ORCA program system, version 4.0 / F. Neese // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2018. – Vol. 8. – p. e1327.

4. *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.

5. *Bader R.F.W.* Atoms in Molecules: A Quantum Theory / Richard F. W. Bader. – Oxford: Clarendon press, 1994. – 433 p.

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. *Szalewicz K.* Symmetry ‐ adapted perturbation theory of intermolecular forces / K. Szalewicz // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2012. – Vol. 2. – p. 254–272

References

1. GOERIGK, L., & GRIMME, S. (2010) Efficient and Accurate Double-Hybrid-Meta-GGA Density Functionals – Evaluation with the Extended GMTKN30 Database for General Main Group Thermochemistry, Kinetics, and Noncovalent Interactions. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 7, 291–309

2. 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.

3. *NEESE, F.* (2018) Software update: the ORCA program system, version 4.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 8, e1327.

4. 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.

5. BADER, R.F.W. (1990) *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*, Oxford University Press.

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. SZALEWICZ, K. (2012). Symmetry ‐ adapted perturbation theory of intermolecular forces. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2(2), 254-272.

Надійшла до редколегії 28.04.18

Підписано до друку . Формат _______. Друк. офс.
Папір офс. №__. Друк. арк. ____. Тираж ______. Зам. ____.
Друкарня ___________________.