

**Координационный Совет научного журнала  
«Вестник Российского университета дружбы народов»:**

**Филиппов В. М.** — ректор РУДН, доктор физико-математических наук, профессор, академик РАО — *председатель Совета*

**Зарюто С. А.** — заместитель директора ИПК РУДН — *ответственный секретарь Совета*

**Члены Координационного Совета:**

**Абрамов А. Ю.** — директор медицинского института РУДН, доктор медицинских наук, доцент

**Балыхина Т. М.** — декан факультета повышения квалификации преподавателей русского языка как иностранного РУДН, доктор педагогических наук, профессор

**Барабаш В. В.** — декан филологического факультета РУДН, доктор филологических наук, профессор

**Воскресенский Л. Г.** — декан факультета физико-математических и естественных наук РУДН, доктор химических наук, профессор

**Давтян М. А.** — декан экономического факультета РУДН, доктор экономических наук, профессор

**Ефремов А. П.** — проректор по учебной работе РУДН, доктор физико-математических наук, профессор

**Кирабаев Н. С.** — первый проректор — проректор по научной работе РУДН, доктор философских наук, профессор

**Мосейкин Ю. Н.** — декан экономического факультета РУДН, доктор экономических наук, профессор

**Плющиков В. Г.** — директор Аграрно-технологического института РУДН, доктор сельскохозяйственных наук, профессор

**Пономарев Н. К.** — декан инженерного факультета РУДН, кандидат технических наук, доцент

**Цвык В. А.** — декан факультета гуманитарных и социальных наук РУДН, доктор философских наук, профессор

**Черных Н. А.** — декан экологического факультета РУДН, доктор биологических наук, профессор

**Шаронов В. Н.** — директор ИПК РУДН, кандидат физико-математических наук

**Якушев В. В.** — декан факультета русского языка и общеобразовательных дисциплин РУДН, кандидат химических наук, доцент

**Ястребов О. А.** — директор юридического института РУДН, доктор юридических наук, профессор

**Индекс журнала в каталоге подписных изданий  
Агентства «Роспечать» — 18235**

ISSN Print 2312-9735

ISSN Online 2312-9743

© Российский университет дружбы народов, 2016

**РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ СЕРИИ  
«МАТЕМАТИКА. ИНФОРМАТИКА. ФИЗИКА»**

**Рыбаков Юрий Петрович** — Заслуженный деятель науки РФ, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и механики РУДН — *главный редактор*

**Севастьянов Леонид Антонович** — доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН — *заместитель главного редактора*

**Члены редколлегии**

**Ильгисонис Виктор Игоревич** — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной физики РУДН, начальник отдела теории плазмы Российского научного центра «Курчатовский институт»

**Самуйлов Константин Евгеньевич** — доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной информатики и теории вероятностей РУДН

**Скубачевский Александр Леонидович** — доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики РУДН

**Датта Гупта Субхашини** (Индия) — профессор Хайдерабадского университета

**Мартикайнен Олли Эрки** (Финляндия) — PhD., научный сотрудник Научно-исследовательского института экономики Финляндии

**Медведев М. В.** (США) — доктор физико-математических наук, профессор Канзасского университета

**Орландо Рафаэль Рамирез Инестрозо** (Испания) — профессор Барселонского университета

**Саха Биджан** (Бангладеш) — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований, г. Дубна

**Чулуунбаатар Очбадрах** (Монголия) — доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института математики Монгольского государственного университета, начальник сектора лаборатории информационных технологий Объединённого института ядерных исследований, г. Дубна

**EDITORIAL BOARD**  
**Series “Mathematics. Information Sciences. Physics”**

**Rybakov Yu. P.** — DSc in Physics and Mathematics, professor, Honored Scientist of Russia, Head to the Department of Theoretical Physics and Mechanics of PFUR — *Editor-in-Chief of the series*

**Sevastianov L. A.** — DSc in Physics and Mathematics, professor, professor of the Department of Applied Probability and Informatics of PFUR — *Vice Editor-in-Chief of the series*

**Members of the editorial board**

**Il’gisonis V. I.** — DSc in Physics and Mathematics, professor, Head to the Department of Applied Physics of PFUR, Head to the Department of Plasma Theory in Scientific Center of Russia “Kurchatov Institute”

**Samouylov K. E.** — DSc in Engineering, professor, Head to the Department of Applied Probability and Informatics of PFUR

**Skubachevski A. L.** — DSc in Physics and Mathematics, professor, Head to the Department of Applied Mathematics of PFUR

**Datta Gupta Subhashish** (India) — PhD in Physics and Mathematics, professor of Hyderabad University

**Martikainen Olli Erkki** (ETLA, Helsinki) — PhD in Engineering, member of the Research Institute of the Finnish Economy

**Medvedev M. V.** (USA) — DSc in Physics and Mathematics, professor of the Kansas University

**Ramirez Inostrozo Orlando Raphael** (Spain) — DSc in Physics and Mathematics, professor of the Barcelona University

**Saha Bijan** (Bangladesh) — DSc in Physics and Mathematics, leading researcher in Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

**Chuluunbaatar Ochbadrah** (Mongolia) — DSc in Physics and Mathematics, leading researcher in the Institute of Mathematics, State University of Mongolia, Head to the Department in Laboratory of Information Technologies of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna

# Вестник Российского университета дружбы народов

НАУЧНЫЙ ЖУРНАЛ

Основан в 1993 году

*Серия*

Математика. Информатика. Физика  
2016, № 2

Российский университет дружбы народов

---

## СОДЕРЖАНИЕ

### Математическая теория телетрафика и сети телекоммуникаций

Башарин Г. П., Гайдамака Ю. В., Русина Н. В. Анализ и алгоритм расчёта вероятностных характеристик для одного абонентского узла пассивной оптической сети . . . . . 5

### Математическое моделирование

Жанлав Т., Миждиддорж Р. Аппроксимация решения краевых задач локально-кубическим сплайном . . . . . 13

Беляева И. Н., Чеканов Н. А., Чеканова Н. Н. Символьно-численное решение уравнения Шредингера для вращающегося тела методом диагонализации . . . . . 24

Любин П. Г. Об одном методе сглаживания двумерной поверхности . . . . . 37

Горбачев А. В., Зорин А. В., Севастьянов Л. А. Модель квантовых измерений Курьшкина-Вудкевича для атомов и ионов с одним валентным электроном . . . . . 44

### Теоретическая механика

Мухарлямов Р. Г., Амабили М., Гарзиера Р., Рябова К. Устойчивость нелинейных колебаний пологих оболочек двойкой кривизны . . . . . 53

### Информатика и вычислительная техника

Стефанюк В. Л., Алхуссаин А. Х. Симметричное шифрование на основе метода расщепления . . . . . 64

## Физика

Алиев С. А. Свойства плёнок диоксида титана с металлическими наночастицами . . . . .	73
<b>Бештоев Х. М.</b> Замечания к стандартной теории осцилляции $K^0$ , $\bar{K}^0$ мезонов. Нарушение странности — $S$ и $CP$ чётности в слабых взаимодействиях в системе $K^0$ , $\bar{K}^0$ мезонов . . . . .	87
Сведения об авторах . . . . .	95
Правила оформления статей . . . . .	96

# Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia

SCIENTIFIC JOURNAL

Founded on 1993

*Series*

**Mathematics. Information Sciences. Physics**  
**2016, No 2**

Peoples' Friendship University of Russia

---

## CONTENTS

### Mathematical Theory of Teletraffic and Telecommunication Networks

**Basharin G. P., Gaidamaka Yu. V., Rusina N. V.** Probability Characteristic  
Analysis and Computation Algorithm of One ONU Upstream in WDM-TDMA PON 5

### Mathematical Modeling

**Zhanlav T., Mijiddorj R.** Local-Cubic Spline for Approximate Solution of  
Boundary Value Problems . . . . . 13

**Belyaeva I. N., Chekanov N. A., Chekanova N. N.** Symbolic-Numeric Solu-  
tion the Shroedinger Equation for Rotating Solid Body by Diagonalisation Method 24

**Lyubin P. G.** On a Method of Two-Dimensional Smoothing . . . . . 37

**Gorbachev A. V., Sevastianov L. A., Zorin A. V.** Kuryshkin-Wodkiewicz  
Model of Quantum Measurements for Atoms and Ions with One Valence Electron . 44

### Theoretical Mechanics

**Mukharlyamov R. G., Amabili M., Garziera R., Riabova K.** Stability of  
Non-Linear Vibrations of Doubly Curved Shallow Shells . . . . . 53

### Computer Science and Computer Engineering

**Stefanyuk V. L., Alhussain A. H.** Symmetric Encryption on the Base of  
Splitting Method . . . . . 64

## Physics

<b>Aliev S. A.</b> Properties of Titanium Dioxide Films with Metallic Nanoparticles . .	73
<b>Beshtoev Kh. M.</b> Remarks to the Standard Theory of $K^0$ , $\bar{K}^0$ Meson Oscillations. $S$ -Strangeness and $CP$ -Violation in Weak Interactions in System of $K^0$ , $\bar{K}^0$ Mesons . . . . .	87
Information about the authors . . . . .	95
Guidelines for Authors . . . . .	96

---

# Математическая теория телетрафика и сети телекоммуникаций

УДК 621.39

**Анализ и алгоритм расчёта вероятностных характеристик для одного абонентского узла пассивной оптической сети**

**Г. П. Башарин, Ю. В. Гайдамака, Н. В. Русина**

*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

В настоящее время телекоммуникационная индустрия претерпевает беспрецедентные изменения, связанные с переходом от голосовых систем к системам передачи данных, что является следствием бурного развития сетей связи, быстрого роста числа пользователей, увеличения числа предоставляемых услуг и их качества. Эволюция сетей доступа идёт по двум основным направлениям: развитие высокоскоростного доступа для предоставления услуг с высоким уровнем качества обслуживания и уменьшение доли медных кабелей при организации местных сетей. Доминирующее положение занимает трафик данных, который в свою очередь требует создания сетей связи с высокой пропускной способностью на базе технологии коммутации пакетов. Поэтому большое внимание уделяется сетям, при построении которых задействованы оптические и оптоэлектронные компоненты. Пассивная оптическая сеть – это полностью оптическая сеть, которая использует в своей архитектуре только пассивные оптические компоненты, исключая преобразование сигнала из электрической формы в оптическую и наоборот. Передача трафика в такой сети может быть реализована как на базе временного, так и на базе частотного разделения каналов. В работе представлена модель фрагмента мультисервисной пассивной оптической сети, в которой осуществляется передача восходящего потока трафика с учётом особенностей функционирования оптических абонентских узлов и принципа динамического распределения длин волн. Результаты анализа процесса передачи трафика применяются в анализе вероятностных характеристик предложенной модели.

**Ключевые слова:** пассивная оптическая сеть, оптический линейный терминал, оптический абонентский узел, восходящий поток трафика, мультиплексирование с разделением по длине волны, множественный доступ с разделением по времени, вероятность блокировки

## 1. Введение

Пассивная оптическая сеть (PON, Passive Optical Network) представляет собой сеть оптического доступа [1–3], [4, §1.5], [5–9], которая обеспечивает передачу различных классов сетевого трафика между оптическим линейным терминалом (OLT, Optical Line Terminal) и оптическими абонентскими узлами (ONU, Optical Network Unit) с использованием пассивного оптического мультиплексора / демультиплексора, который объединяет / разделяет спектральные каналы в одном оптоволокне. Спектральный канал — это канал передачи данных, устанавливаемый между абонентским узлом и линейным терминалом и осуществляющий передачу данных на выделенной длине волны.

В соответствии с технологией множественного доступа с разделением по времени (TDMA, Time Division Multiple Access) [6, 7], абонентский узел может находиться в активном состоянии, т.е. осуществлять передачу абонентских данных к линейному терминалу в выделенном ему временном домене, или в пассивном состоянии, при котором передача таких данных приостановлена.

---

Статья поступила в редакцию 19 января 2016 г.

Исследование выполнено при частичной финансовой поддержке РФФИ в рамках научных проектов № 15-07-03051, 15-07-03608.

В соответствии с технологией мультиплексирования с разделением по длине волны (WDM, Wavelength Division Multiplexing) [2, 3], [4, §7.5–§7.6], [5–8] для передачи потока трафика от абонентского узла к линейному терминалу выделено конечное число  $W$  длин волн.

Каждый абонентский узел использует перенастраиваемый лазер и может осуществлять передачу данных к линейному терминалу в выделенном диапазоне длин волн. Таким образом, механизм динамического распределения длин волн позволяет увеличить ёмкость всей системы, предоставить возможность гибкого масштабирования, а также с учётом TDMA технологии использовать имеющийся частотный план для подключения новых абонентских узлов и обеспечения требуемого уровня качества обслуживания.

Рассматриваемую сеть WDM-TDMA PON с динамическим распределением длин волн для краткости будем называть сетью I.

В сети I решается задача распределения ограниченного числа  $W \leq L$  длин волн между конечным числом  $L$  абонентских узлов. В случае, когда в момент включения абонентского узла на линейном терминале нет свободной длины волны, происходит блокировка передачи данных в выделенном абонентскому узлу временном домене.

Рассмотрим модель совместного функционирования абонентских узлов в фрагменте сети I, параметры которой представлены в табл. 1.

Таблица 1

Параметры модели совместного функционирования абонентских узлов

Параметр	Описание
$L$	Число абонентских узлов в сети
$W, W \leq L$	Число длин волн в сети
$\kappa_l, l = \overline{1, L}$	Интенсивность поступления $l$ -запросов на выделение длины волны
$\nu_l, l = \overline{1, L}$	Интенсивность перехода $l$ -го абонентского узла из активного состояния в пассивное

Вероятность  $\alpha_l$  отсутствия блокировки передачи данных на  $l$ -м абонентском узле рассчитывается по формулам (см. [10, 11]):

$$\alpha_l = 1 - G_1^{-1} g_{l, \text{OFF}}(W), G_1 = \sum_{w=0}^W g(L, w), \quad (1)$$

$$g_{l, \text{OFF}}(w) = \begin{cases} 1, & w = 0, \\ g(L, w) - \alpha_l g_{l, \text{OFF}}(w - 1), & w = \overline{1, W}, \end{cases} \quad (2)$$

$$g(l, w) = \begin{cases} 0, & l = 0, \quad w = \overline{1, W}, \\ 1, & l = \overline{0, L}, \quad w = 0, \\ g(l - 1, w) + \alpha_l g(l - 1, w - 1), & l = \overline{1, L}, \quad w = \overline{1, W}, \end{cases} \quad (3)$$

где  $\alpha_l := \frac{\kappa_l}{\nu_l}$ ,  $l = \overline{1, L}$ .

Величина  $1 - \alpha_l$  называется вероятностью блокировки передачи данных на  $l$ -м абонентском узле из-за отсутствия свободной длины волны и является одним из основных показателей эффективности функционирования сети I.

## 2. Модель передачи восходящего потока трафика от одного абонентского узла в сети I

Рассмотрим процесс передачи восходящего потока трафика от одного абонентского узла к линейному терминалу в сети I. Модель абонентского узла представляет собою однолинейную систему массового обслуживания (СМО) с буферным накопителем ёмкостью  $R$ ,  $0 < R < \infty$ , условных единиц. Исследуемая СМО обслуживает  $K$  типов заявок.

**Условие 1.** Потоки поступления  $k$ -заявок любого класса пуассоновские с постоянными интенсивностями  $\lambda_k$ ,  $0 < \lambda_k < \infty$ ,  $k = \overline{1, K}$ , и независимы в совокупности. Каждая  $k$ -заявка требует для своего обслуживания  $b_k$ ,  $0 < b_k \leq R$ , условных единиц, которые занимают в буфере накопителе при поступлении в СМО и освобождаются сразу после завершения обслуживания вместе с освобождением длины волны.

Дисциплина выбора заявок из очереди — в порядке поступления (FCFS, First Come First Served).

**Условие 2.** Если в момент поступления новой  $k$ -заявки,  $k = \overline{1, K}$ , в системе оказались заняты больше, чем  $R - b_k$  условных единиц в буфере-накопителе, то поступившая  $k$ -заявка получает отказ и теряется, не влияя на интенсивность поступления поровнившего её пуассоновского потока.

**Условие 3а.** Время обслуживания  $k$ -заявки в системе распределено по экспоненциальному закону с параметром  $\mu_k$ ,  $0 < \mu_k < \infty$ ,  $k = \overline{1, K}$ .

Такую модель передачи восходящего потока трафика будем кодировать  $\mathbf{M} \mid \mathbf{M} \mid 1 \mid 0 < R < \infty$  [4]. Однако она не учитывает того, что в момент включения абонентского узла на линейном терминале может не быть свободной длины волны, что приводит к блокировке передачи данных в выделенном абонентском узлу временном домене.

**Условие 3б.** Учитывая данную особенность и результаты предыдущего раздела, примем интенсивность обслуживания  $k$ -заявки равной

$$\alpha \mu_k, k = \overline{1, K}, \tag{4}$$

где  $\alpha$ ,  $0 < \alpha < 1$ , — вероятность отсутствия блокировки передачи данных на абонентском узле (1)–(3).

Схема СМО, описывающей функционирование абонентского узла, представлена на рис. 1.

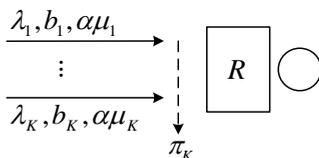


Рис. 1. Схема СМО

СМО на рис. 1 описывается с помощью следующих параметров:

$\mathbf{m} := (m_k)_{k=\overline{1, K}}$ ,  $m_k \in \left\{0, 1, \dots, \left\lfloor \frac{R}{b_k} \right\rfloor\right\}$  — вектор состояния СМО, обозначающий число заявок каждого типа в буферном накопителе абонентского узла;

$S := \{\mathbf{m} \mid 0 \leq \mathbf{b}^T \mathbf{m} \leq R\}$  — пространство состояний СМО;

$S_k := \{\mathbf{m} \in S \mid \mathbf{b}^T \mathbf{m} \leq R - b_k\}$  — подпространство приёма  $k$ -заявок,  $k = \overline{1, K}$ ;

$\bar{S}_k = S \setminus S_k = \{\mathbf{m} \in S \mid \mathbf{b}^T \mathbf{m} > R - b_k\}$  — подпространство блокировки  $k$ -заявок,  $k = \overline{1, K}$ .

Функционирование СМО на рис. 1 будем описывать с помощью ступенчатого марковского процесса (СтМП)  $\mathbf{Y}(t) = (Y_k(t))_{k=\overline{1, K}}$  с пространством состояний  $S$  и конечной матрицей интенсивностей переходов. Здесь  $Y_k(t)$  — число  $k$ -заявок в абонентском узле в момент времени  $t > 0$ .

**Условие 4.** Примем дополнительно, что матрица интенсивностей переходов неразложима (все состояния из  $S$  сообщаются).

**Теорема 1.** Если для системы выполняются условие 1 – условие 4, то её описывает СтМП  $\mathbf{Y}(t)$  со стационарным распределением вероятностей мультипликативной формы:

$$p(\mathbf{m}) = G_2^{-1} \frac{1}{\alpha^{m_\bullet}} \prod_{k=1}^K \rho_k^{m_k}, \quad (5)$$

$$G_2 = \frac{1}{p(\mathbf{0})} = \sum_{\mathbf{m} \in S} \frac{1}{\alpha^{m_\bullet}} \prod_{k=1}^K \rho_k^{m_k}, \quad (6)$$

где  $\mathbf{m} \in S$ ,  $\rho_k := \frac{\lambda_k}{\mu_k}$ ,  $k = \overline{1, K}$ ,  $m_\bullet := \sum_{k=1}^K m_k$ .

Доказательство теоремы 1 аналогично доказательству, представленному в [4, §2.4].

Тогда вероятность блокировки  $k$ -заявок из-за ограниченной ёмкости буферного накопителя рассчитывается по формуле

$$\pi_k = \frac{1}{G_2} \sum_{\mathbf{m} \in \overline{S}_k} \frac{1}{\alpha^{m_\bullet}} \prod_{k=1}^K \rho_k^{m_k}, \quad k = \overline{1, K}. \quad (7)$$

Чтобы вычислить вероятность блокировки  $k$ -заявок, необходимо рассчитать нормирующую константу  $G_2$ . В силу мультипликативности стационарного распределения вероятностей (5)–(6) константа  $G_2$  может быть вычислена с помощью модифицированного свёрточного алгоритма Бузена, который широко используется по настоящее время в теории телетрафика [4, §4.5], [11, 12].

**Теорема 2.** Нормирующая константа  $G_2$  (6) вычисляется по формулам

$$G_2 = \sum_{r=0}^R g(K, r), \quad (8)$$

$$g(k, r) = \begin{cases} 0, & k = 0, \quad r = \overline{1, R}, \\ 0, & k = \overline{0, K}, \quad r < 0, \\ 1, & k = \overline{0, K}, \quad r = 0, \\ g(k-1, r) + \frac{\rho_k}{\alpha} g(k, r - b_k), & k = \overline{1, K}, \quad r = \overline{1, R}, \end{cases} \quad (9)$$

где  $\rho_k := \lambda_k / \mu_k$ ,  $k = \overline{1, K}$ .

Тогда вероятность блокировки  $k$ -заявок в сети I из-за ограниченной ёмкости буферного накопителя будет рассчитываться по формуле

$$\pi_k = G_2^{-1} \sum_{r=R-b_k+1}^R g(K, r), \quad k = \overline{1, K}. \quad (10)$$

### 3. Пример численного анализа

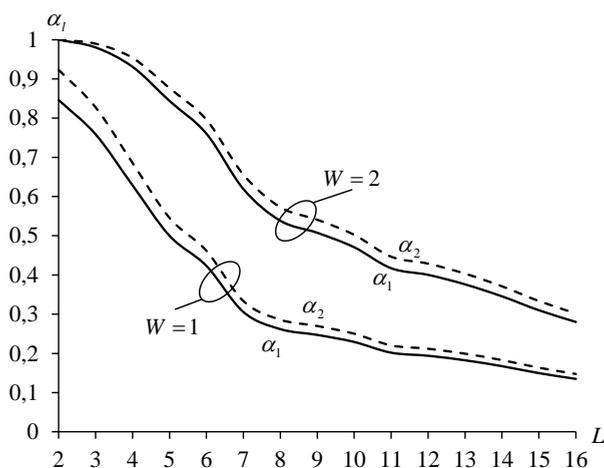
Рассмотрим модель совместного функционирования абонентских узлов в фрагменте сети I. Значения параметров модели приведены в табл. 2.

Таблица 2

**Значения параметров модели совместного функционирования абонентских узлов**

Параметр	Значение	Параметр	Значение	Параметр	Значение
$L$	2, 16	$a_5$	0.45	$a_{11}$	0.65
$W$	1, 2	$a_6$	0.4	$a_{12}$	0.22
$a_1$	0.1	$a_7$	1	$a_{13}$	0.36
$a_2$	0.2	$a_8$	0.6	$a_{14}$	0.54
$a_3$	0.15	$a_9$	0.25	$a_{15}$	0.78
$a_4$	0.3	$a_{10}$	0.35	$a_{16}$	0.8

На рис. 2 представлен график зависимости вероятности отсутствия блокировки передачи данных на 1-м и 2-м абонентских узлах от изменения числа абонентских узлов при фиксированном числе длин волн.



**Рис. 2. Зависимость вероятностей отсутствия блокировки передачи данных от числа абонентских узлов**

Вероятность отсутствия блокировки передачи данных на абонентском узле убывает, потому что при увеличении числа абонентских узлов в сети I, которые требуют для своей работы выделения длины волны, возрастает вероятность того, что в момент включения некоторого абонентского узла все длины волн на линейном терминале заняты.

При  $W = 2$  в точке  $L = 2$  вероятность отсутствия блокировки передачи данных  $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ , потому что в этом случае для каждого абонентского узла выделена своя длина волны для передачи.

Волнообразное поведение графиков объясняется значениями параметра  $a_l$ ,  $l = \overline{1, L}$ , представленных в табл. 2. Например, сравним поведение графиков между значениями  $L = 6; 7$  и  $L = 7; 8$ . В первом случае скорость убывания графиков выше,

потому что в сеть добавляется абонентский узел с нагрузкой по запросам на выделение длины волны  $a_7 = 1$ , а во втором –  $a_8 = 0.6$ .

Вероятность отсутствия блокировки передачи данных  $\alpha_1 < \alpha_2$  при любом значении параметра  $W$ , потому что нагрузка по запросам на выделение длины волны  $a_1 < a_2$  в исходных данных, представленных в табл. 2.

Вероятность отсутствия блокировки передачи данных при  $W = 2$  больше, чем при  $W = 1$ , потому что чем больше длин волн выделено в сети I, тем меньше вероятность блокировки передачи данных на абонентских узлах из-за отсутствия свободной длины волны.

Рассмотрим модель передачи трафика от одного абонентского узла к линейному терминалу в сети I, значения параметров которой приведены в табл. 3.

**Таблица 3**

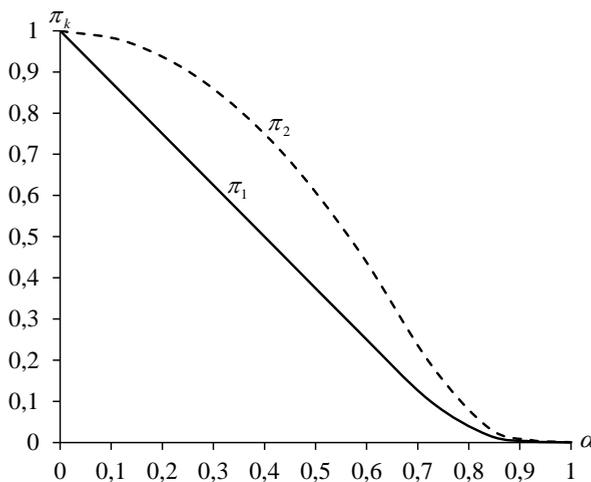
**Значения параметров модели совместного функционирования абонентских узлов**

Параметр	Значение
$K$	2
$R$	28
$\mathbf{b}^T$	(1; 2)
$\boldsymbol{\rho}^T$	(0, 8; 0, 25)

Рассмотрим зависимость вероятности блокировки  $k$ -заявок в модели передачи трафика от одного абонентского узла к линейному терминалу в сети I от изменения вероятности отсутствия блокировки передачи данных на абонентском узле.

На рис. 3 представлен график зависимости  $\pi_1$  и  $\pi_2$  от изменения значения параметра  $\alpha$ .

Значения параметра  $\alpha := \alpha_1$  рассчитаны по формулам (1)–(3) исходя из модели совместного функционирования абонентских узлов в сети I, параметры которой приведены в табл. 2, при фиксированном  $L = 16$ .



**Рис. 3. Зависимость вероятностей блокировки заявок от вероятности отсутствия блокировки передачи данных**

С увеличением вероятности отсутствия блокировки передачи данных на абонентском узле вследствие увеличения числа длин волн, предоставляемых в сети I, вероятность блокировки  $k$ -заявок уменьшается.

Значение вероятности отсутствия блокировки передачи данных на абонентском узле прямо пропорционально числу  $W$  длин волн и обратно пропорционально числу  $L$  абонентских узлов в сети I.

## 4. Заключение

В настоящей статье построена математическая модель передачи восходящего потока мультисервисного трафика от одного абонентского узла к линейному терминалу в сети I и предложен алгоритм нахождения вероятностей блокировки заявок. Приводится пример численного анализа, в котором отражена роль параметра  $\alpha$  при выборе оптимального режима функционирования абонентских узлов.

Авторы предполагают использовать представленный в статье подход для построения алгоритма расчёта вероятностей блокировки заявок в модели передачи восходящего потока приоритетного трафика в сети I.

## Литература

1. Кузьмичев В. Н., Маккавеев В. И., Светиков Ю. В. Зарождение и развитие оптической многоканальной связи в СССР // Электросвязь. — 2013. — № 6. — С. 9–14.
2. Гринфилд Д. Оптические сети, пер. с англ. — Киев: ДиаСофтЮП, 2002.
3. Листвин В. Н., Трещиков В. Н. DWDM системы. Второе издание. — М.: ТЕХНОСФЕРА, 2015.
4. Башарин Г. П. Лекции по математической теории телетрафика. Изд. 3-е, перераб. и доп. — М.: РУДН, 2009.
5. Ефимушкин В. А., Савандюков И. М. Распределение ресурсов в оптических транспортных сетях: Учебное пособие. — М.: ЦНИИС, 2010.
6. Ramaswami R., Sivarajan K. N., Sasaki G. H. Optical Networks: A practical Perspective. Third Edition. — Morgan Kaufmann, 2009.
7. Mukherjee B. Optical WDM Networks. — Springer, 2006.
8. Siva Ram Murthy C., Gurusamy M. WDM Optical Networks: Concepts, Design and Algorithms. — PrenticeHall PTR, 2002.
9. Stability of Multi-Wavelength Optical Buffers with Delay-Oriented Scheduling / E. Morozov, W. Rogiest, K. De Turk, D. Fiems, H. Bruneel // Transactions on Emerging Telecommunication Technologies. — 2012. — Vol. 23, No 3. — Pp. 217–226.
10. Башарин Г. П., Гайдамака Ю. В., Русина Н. В. Алгоритм расчета вероятностных характеристик функционирования оптических абонентских узлов в пассивной оптической сети // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2015. — № 2. — С. 28–32.
11. Наумов В. А., Самуйлов К. Е., Яркина Н. В. Теория телетрафика мультисервисных сетей. Монография. — М.: РУДН, 2008.
12. Basharin G. P., Gaidamaka Y. V., Samouylov K. E. Mathematical Theory of Teletraffic and Its Application to the Analysis of Multiservice Communication of Next Generation Networks // Automatic Control and Computer Sciences. — 2013. — Vol. 47, No 2. — Pp. 62–69.

UDC 621.39

## Probability Characteristic Analysis and Computation Algorithm of One ONU Upstream in WDM-TDMA PON

G. P. Basharin, Yu. V. Gaidamaka, N. V. Rusina

*Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia*

Nowadays, the telecommunication industry undergoes fundamental changes, associated with transition from voice to data-link systems. It's due to telecommunication network revolution, rapid growth of user count, increasing number of provide service and quality of service. Access network evaluation is being conducted in both directions, such as high bit rate access development for providing high quality of service and decrease length of cooper wiring in local line networks. Data traffic dominates in the networks and requires the creation of networks with high bandwidth based on packet switching. Therefore, it's paid special attention to the networks, which are based on optical and optoelectronic components. Passive optical network is an all optical network based on passive optical components only, which exclude the conversion of electrical signal into optical form and vice versa. Traffic transmission in the networks may be implemented using time division multiple access (TDMA) and wavelength division multiplexing (WDM) technologies. In the present paper, we propose a fragment of the multiservice passive optical network with upstream traffic carrying considering the functioning process of optical network units (ONU) and the principle of wavelength dynamic distribution. These results are used in the blocking probability analysis of the model.

**Key words and phrases:** Passive Optical Network (PON), Optical Line Terminal (OLT), Optical Network Unit (ONU), upstream, Wavelength Division Multiplexing (WDM), Time Division Multiple Access (TDMA), blocking probability

### References

1. V. N. Kuzmichev, V. I. Makkaveev, J. V. Svetikov, Beginning and Evolution of Optical Multichannel Operarion in the USSR, *Electrosviaz* (6) (2013) 9–14, in Russian.
2. D. Greenfield, *Optical Networks*, DiaSoftUP, Kiev, 2002, in Russian.
3. V. N. Listvin, V. N. Treschikov, *DWDM Systems*. The 2-nd edition, Technosphera, M., 2015, in Russian.
4. G. P. Basharin, *Lectures on Mathematical Teletraffic Theory*. The 3-rd edition, PFUR, Moscow, 2009, in Russian.
5. V. A. Ephimyshkin, I. M. Savandukov, *Resource Distribution in Optical Transport Networks: Study Guide*, CSE, Moscow, 2010, in Russian.
6. R. Ramaswami, K. N. Sivarajan, G. H. Sasaki, *Optical Networks: A practical Perspective*. Third Edition, Morgan Kaufmann.
7. B. Mukherjee, *Optical WDM Networks*, Springer, 2006.
8. C. Siva Ram Murthy, M. Gurusamy, *WDM Optical Networks: Concepts, Design and Algorithms*, PrenticeHall PTR, 2002.
9. E. Morozov, W. Rogiest, K. De Turk, D. Fiems, H. Bruneel, Stability of multi-wavelength optical buffers with delay-oriented scheduling, *Transactions on Emerging Telecommunication Technologies* 23 (3) (2012) 217–226.
10. G. P. Basharin, Y. V. Gaidamaka, N. V. Rusina, Probability characteristic computation algorithm of onus functioning in pon, *Bulletin of Peoples' Friendship University of Russia. Series "Mathematics. Information Sciences. Physics"* (2) (2015) 28–32, in Russian.
11. V. A. Naymov, K. E. Samouylov, V. Yarkina, N. *Teletraffic Theory of Multiservice Networks*. Monography., PFUR, Moscow, 2008.
12. G. P. Basharin, Y. V. Gaidamaka, K. E. Samouylov, Mathematical theory of teletraffic and its application to the analysis of multiservice communication of next generation networks, *Automatic Control and Computer Sciences* 47 (2) (2013) 62–69.

---

# Математическое моделирование

УДК 519.624.2

## Аппроксимация решения краевых задач локально-кубическим сплайном

Т. Жанлав\*, Р. Мижиддорж†

\* Монгольский государственный университет, г. Улан-Батор, Монголия

† Государственный университет образования, г. Улан-Батор, Монголия

Построен явный локально-кубический сплайн для аппроксимации гладких функций и рассмотрены его аппроксимативные свойства. Предложена сплайн-схема для численного решения краевых задач, основанная на свойствах локально-кубического сплайна и обычного коллокационного кубического сплайна. Схема реализуется путём последовательного решения двух трёхдиагональных систем, отличающихся друг от друга лишь правой частью, что позволяет использовать метод трёхточечной прогонки. Это свидетельствует о том, что данный алгоритм является эффективным, количество операций линейно зависит от числа узлов сетки. Доказано, что построенный сплайн обладает такими же аппроксимативными свойствами, что и локально-кубический сплайн. Таким образом, в данной работе фактически рассматриваются вопросы аппроксимации решений краевых задач. Предложенная схема позволяет найти решение краевой задачи и его первую и вторую производные в узлах равномерной сетки с точностью четвёртого порядка по шагу сетки. Теоретические выводы подтверждены численными экспериментами. Благодаря хорошим аппроксимативным свойствам и простоте алгоритма реализации предложенный метод может быть применён для численного решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, которые часто встречаются как в математике, физике, так и в области естественных и инженерных наук.

**Ключевые слова:** краевые задачи, кубический сплайн, повышенная точность

### 1. Введение

Пусть требуется найти решение краевой задачи

$$Lu \equiv y'' + p(x)y' + q(x)y = f(x), \quad x \in [a, b], \quad (1)$$

$$\begin{aligned} e_1 y(a) &\equiv \theta_1 y(a) + \beta_1 y'(a) = \gamma_1, \\ e_2 y(b) &\equiv \theta_2 y(b) + \beta_2 y'(b) = \gamma_2. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $p(x)$ ,  $q(x)$  и  $f(x)$  достаточно гладкие функции, причём  $q(x) < 0$  на  $[a, b]$ .

Постоянные в краевых условиях (2) заданы, и  $\theta_i \geq 0$ ,  $\beta_1 \leq 0$ ,  $\beta_2 \geq 0$ . В дальнейшем мы считаем, что решение задачи (1), (2) существует и единственно, и оно является достаточно гладким. Для численного решения задачи (1), (2) введена на  $[a, b]$  равномерная сетка  $\Delta_N = \{x_i = a + ih, i = 0, 1, \dots, N, h = \frac{b-a}{N}\}$ . Ищем решение задачи (1), (2) в виде кубических сплайнов класса  $C^2[a, b]$ , т.е.

$$y(x) \approx S(x) = \sum_{j=-1}^{N+1} \alpha_j B_j(x), \quad (3)$$

где  $B_j(x)$  — нормализованные кубические  $B$ -сплайны [1].

Для использования  $B$ -представления (3) предполагается, что дополнена равномерная сетка  $\Delta_N$  с точками

$$x_{-3} < x_{-2} < x_{-1} < x_0, \quad x_N < x_{N+1} < x_{N+2} < x_{N+3}. \quad (4)$$

Хорошо известный метод сплайн-коллокации

$$\begin{aligned} LS(x_i) &= f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, N, \\ e_1 S(a) &= \gamma_1, \quad e_2 S(b) = \gamma_2, \end{aligned} \quad (5)$$

даёт систему [1]

$$A_i \alpha_{i-1} - C_i \alpha_i + B_i \alpha_{i+1} = h^2 f_i, \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad (6a)$$

$$\begin{aligned} (\theta_1 h - 3\beta_1) \alpha_{-1} + 4h\theta_1 \alpha_0 + (\theta_1 h + 3\beta_1) \alpha_1 &= 6h\gamma_1, \\ (\theta_2 h - 3\beta_2) \alpha_{N-1} + 4h\theta_2 \alpha_N + (\theta_2 h + 3\beta_2) \alpha_{N+1} &= 6h\gamma_2, \end{aligned} \quad (6b)$$

где

$$A_i = -\frac{h}{2} p_i + \frac{h^2}{6} q_i, \quad C_i = 2 - \frac{2}{3} h^2 q_i, \quad B_i = 1 + \frac{h}{2} p_i + \frac{h^2}{6} q_i.$$

Система (6) имеет единственное решение при достаточно малом  $h$  и решается методом трёхточечной прогонки. Для коллокационного сплайна справедливы [1]

$$S_i^{(r)} - y_i^{(r)} = O(h^2), \quad r = 0, 1, 2, \quad i = 0, 1, \dots, N. \quad (7a)$$

Благодаря аппроксимативному свойству (7a) и простоте алгоритма построения метод сплайн-коллокации, как и метод конечных разностей, часто применяется на практике. В работе [2] была доказана следующая лемма.

**Лемма 1.** Пусть  $r(x)$ ,  $q(x)$  и  $f(x)$  в уравнении (1) достаточно гладкие функции. Тогда для коллокационного кубического сплайна, удовлетворяющего уравнению (5), справедливы соотношения

$$\Delta^2 S_i'' = y_i^{IV} + O(h^2), \quad i = 0, 1, \dots, N, \quad (7b)$$

где

$$\Delta^2 S_i'' = \frac{1}{h^2} \begin{cases} S_{i+1}'' - 2S_i'' + S_{i-1}'', & i = 1, 2, \dots, N-1, \\ 2S_0'' - 5S_1'' + 4S_2'' - S_3'', & i = 0, \\ 2S_N'' - 5S_{N-1}'' + 4S_{N-2}'' - S_{N-3}'', & i = N. \end{cases} \quad (7c)$$

Следует отметить, что в работах [3,4] на основе использования свойств квази-интерполяционных кубических сплайнов построены также сплайн-схемы повышенной точности для решения краевых задач (1), (2).

В последнее время появились много работ, в которых применён локально-кубический сплайн в численном анализе [5–7], особенно в построении явных схем для численного решения различных нелинейных уравнений в частных производных [8,9]. В данной работе построен локально-кубический сплайн для решения краевой задачи (1), (2) и получены схемы решения обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) второго порядка, которые дают тот же порядок аппроксимации и для решения и для его производных первого и второго порядка на узлах сетки.

## 2. Локально-кубический сплайн для решения краевой задачи

Пусть решение краевой задачи (1), (2) известно, и построим для него локально-кубический сплайн. В работе [5] был предложен локально-кубический сплайн

$$\hat{S}(\alpha) = \sum_{j=-1}^{N+1} \hat{\alpha}_j B_j(x), \quad (8)$$

где

$$\hat{\alpha}_k = y_k + \frac{1}{3(h_k + h_{k-1})} \left( h_k^2 \frac{y_k - y_{k-1}}{h_{k-1}} - h_{k-1}^2 \frac{y_{k+1} - y_k}{h_k} \right), \quad k = 1, \dots, N-1, \quad (9a)$$

$$\hat{\alpha}_0 = y_0 + \frac{h_0 - h_{-1}}{3} y'_0 - \frac{h_0 h_{-1}}{6} y''_0, \quad (9b)$$

$$\hat{\alpha}_{-1} = y_0 - \omega h_0 y'_0 + \frac{h_0^2 \omega^2}{3} y''_0,$$

$$\hat{\alpha}_N = y_N + \frac{h_N - h_{N-1}}{3} y'_N - \frac{h_N h_{N-1}}{6} y''_N, \quad (9c)$$

$$\hat{\alpha}_{N+1} = y_N + \omega h_{N-1} y'_N + \frac{h_{N-1}^2 \omega^2}{3} y''_N.$$

Здесь  $h_k = x_{k+1} - x_k$ , ( $h_{-2} = h_{-1} = \omega h_0$ ,  $h_{N+1} = h_N = \omega h_{N-1}$ ), и  $\omega > 0$  – заданный параметр.

Показано, что данный локально-кубический сплайн обладает таким же аппроксимативным свойством, как и интерполяционный кубический сплайн. В случае равномерной сетки формулы (9) принимают вид

$$\hat{\alpha}_k = \frac{-y_{k-1} + 8y_k - y_{k+1}}{6}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1, \quad (10a)$$

$$\hat{\alpha}_0 = y_0 - \frac{h^2}{6} y''_0, \quad \hat{\alpha}_N = y_N - \frac{h^2}{6} y''_N, \quad (10b)$$

$$2\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_{-1} = 3y_0 - h y'_0, \quad 2\hat{\alpha}_N + \hat{\alpha}_{N+1} = 3y_N + h y'_N. \quad (10c)$$

Для аппроксимации производных в (10b) и (10c) мы используем формулы

$$y'_0 = \frac{1}{6h} (-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3) + O(h^3), \quad (11a)$$

$$y'_N = \frac{1}{6h} (11y_N - 18y_{N-1} + 9y_{N-2} - 2y_{N-3}) + O(h^3),$$

$$y''_0 = \frac{1}{h^2} (2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3) + O(h^2), \quad (11b)$$

$$y''_N = \frac{1}{h^2} (2y_N - 5y_{N-1} + 4y_{N-2} - y_{N-3}) + O(h^2),$$

которые справедливы при условии  $y(x) \in C^4[a, b]$ .

В результате подстановки (11) в (10b) и (10c) мы находим  $\hat{\alpha}_0$ ,  $\hat{\alpha}_N$ ,  $2\hat{\alpha}_0 + \hat{\alpha}_{-1}$  и  $2\hat{\alpha}_N + \hat{\alpha}_{N+1}$  с точностью  $O(h^4)$ , и это не снижает точность локально-кубического

сплайна. Таким образом, мы построили на равномерной сетке полностью локально-кубический сплайн, в котором коэффициенты определяются формулами:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_k &= \frac{-y_{k-1} + 8y_k - y_{k+1}}{6}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1, \\ \hat{\alpha}_0 &= \frac{1}{6}(4y_0 + 5y_1 - 4y_2 + y_3), \quad \hat{\alpha}_N = \frac{1}{6}(4y_N + 5y_{N-1} - 4y_{N-2} + y_{N-3}), \\ \hat{\alpha}_{-1} &= \frac{1}{6}(21y_0 - 28y_1 + 17y_2 - 4y_3), \\ \hat{\alpha}_{N+1} &= \frac{1}{6}(21y_N - 28y_{N-1} + 17y_{N-2} - 4y_{N-3}).\end{aligned}\tag{12}$$

Отметим, что в работе [6] положили  $h_{-2} = h_{-1} = h_{N+1} = h_N = 0$ , что соответствует  $\omega = 0$ . Тогда формулы (9b), (9c) приобретают вид

$$\hat{\alpha}_{-1} = y_0, \quad \hat{\alpha}_0 = y_0 + \frac{h}{3}y'_0, \quad \hat{\alpha}_{N+1} = y_N, \quad \hat{\alpha}_N = y_N - \frac{h}{3}y'_N.\tag{13}$$

Если использовать формулу (11a) в последних равенствах, то получим локально-кубический сплайн, полученный в [6], в котором базисные  $B_j$ -сплайны отличны от нуля на интервале  $(x_j, x_{j+4})$ . В отличие от (12) коэффициенты локально-кубического сплайна определяются формулами:

$$\begin{aligned}\hat{\alpha}_k &= \frac{-y_{k-1} + 8y_k - y_{k+1}}{6}, \quad k = 1, 2, \dots, N-1, \\ \hat{\alpha}_{-1} &= y_0, \quad \hat{\alpha}_0 = \frac{7y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3}{18}, \\ \hat{\alpha}_{N+1} &= y_N, \quad \hat{\alpha}_N = \frac{7y_N + 18y_{N-1} - 9y_{N-2} + 2y_{N-3}}{18}.\end{aligned}\tag{14}$$

Для локально-кубического сплайна (8) с коэффициентами, заданными формулой (12), имеют места соотношения:

$$\begin{aligned}\hat{S}''(x_0) &= \frac{1}{h^2}(2y_0 - 5y_1 + 4y_2 - y_3), \quad \hat{S}''(x_1) = \frac{1}{h^2}(y_0 - 2y_1 + y_2), \\ \hat{S}''(x_i) &= \frac{1}{6h^2}(-y_{i-2} + 10y_{i-1} - 18y_i + 10y_{i+1} - y_{i+2}), \quad i = 2, 3, \dots, N-2, \\ \hat{S}''(x_N) &= \frac{1}{h^2}(2y_N - 5y_{N-1} + 4y_{N-2} - y_{N-3}), \\ \hat{S}''(x_{N-1}) &= \frac{1}{h^2}(y_N - 2y_{N-1} + y_{N-2});\end{aligned}\tag{15}$$

$$\begin{aligned}\hat{S}'(x_0) &= \frac{1}{6h}(-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3), \quad \hat{S}'(x_1) = \frac{1}{6h}(2y_0 - 3y_1 + 6y_2 - y_3), \\ \hat{S}'(x_i) &= \frac{1}{12h}(y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}), \quad i = 2, 3, \dots, N-2, \\ \hat{S}'(x_{N-1}) &= \frac{1}{6h}(2y_N + 3y_{N-1} - 6y_{N-2} + y_{N-3}), \\ \hat{S}'(x_N) &= \frac{1}{6h}(11y_N - 18y_{N-1} + 9y_{N-2} - 2y_{N-3})\end{aligned}\tag{16}$$

и

$$\hat{S}(x_i) = \frac{1}{36}(-y_{i-2} + 4y_{i-1} + 30y_i + 4y_{i+1} - y_{i+2}), \quad i = 2, 3, \dots, N-2, \quad (17)$$

$$\hat{S}(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, N-1, N.$$

Справедлива следующая теорема.

**Теорема 1.** Пусть  $y(x) \in C^6[a, b]$ . Тогда для локально-кубического сплайна, аппроксимирующего функцию  $y(x)$ , справедливы соотношения

$$\hat{S}(x_i) = y_i - \frac{h^4}{36}y_i^{IV} + O(h^6), \quad i = 2, 3, \dots, N-2, \quad (18)$$

$$\hat{S}(x_i) = y_i, \quad i = 0, 1, N-1, N,$$

$$\hat{S}'(x_i) = y'_i + O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2,$$

$$\hat{S}'(x_0) = y'_0 + \frac{h^3}{4}y_0^{IV} + O(h^4),$$

$$\hat{S}'(x_1) = y'_1 - \frac{h^3}{12}y_1^{IV} + O(h^4), \quad (19)$$

$$\hat{S}'(x_N) = y'_N + \frac{h^3}{4}y_N^{IV} + O(h^4),$$

$$\hat{S}'(x_{N-1}) = y'_{N-1} - \frac{h^3}{12}y_{N-1}^{IV} + O(h^4)$$

и

$$\hat{S}''(x_i) = y''_i - \frac{h^2}{12}y_i^{IV} + O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2,$$

$$\hat{S}''(x_0) = y''_0 + \frac{h^2}{12}y_0^{IV} - h^2y_1^{IV} + O(h^4),$$

$$\hat{S}''(x_1) = y''_1 + \frac{h^2}{12}y_1^{IV} + O(h^4), \quad (20)$$

$$\hat{S}''(x_{N-1}) = y''_{N-1} + \frac{h^2}{12}y_{N-1}^{IV} + O(h^4),$$

$$\hat{S}''(x_N) = y''_N + \frac{h^2}{12}y_N^{IV} - h^2y_{N-1}^{IV} + O(h^4).$$

**Доказательство.** Формулы (18), (19) и (20) непосредственно проверяются с учётом (13), (14), (15) и  $y(x) \in C^6[a, b]$ .  $\square$

### 3. Аппроксимация решения краевых задач кубическим сплайном

Чтобы построить кубический сплайн, аппроксимирующий решения краевой задачи (1), (2) мы используем теорему 1. Согласно формул (19) и (20) имеем

$$\hat{S}''_0 + p_0\hat{S}'_0 + q_0\hat{S}_0 = f_0 + \frac{h^2}{12}(1 - 3hp_0)y_0^{IV} - h^2y_1^{IV} + O(h^4),$$

$$\hat{S}''_1 + p_1\hat{S}'_1 + q_1\hat{S}_1 = f_1 + \frac{h^2}{12}(1 - hp_1)y_1^{IV} + O(h^4),$$

$$\begin{aligned} \hat{S}_i'' + p_i \hat{S}_i' + q_i \hat{S}_i &= f_i - \frac{h^2}{12} y_i^{IV} + O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N - 2, \\ \hat{S}_{N-1}'' + p_{N-1} \hat{S}_{N-1}' + q_{N-1} \hat{S}_{N-1} &= f_{N-1} + \frac{h^2}{12} (1 - hp_{N-1}) y_{N-1}^{IV} + O(h^4), \\ \hat{S}_N'' + p_N \hat{S}_N' + q_N \hat{S}_N &= f_N + \frac{h^2}{12} (1 - 3hp_N) y_N^{IV} - h^2 y_{N-1}^{IV} + O(h^4). \end{aligned}$$

Эти уравнения можно записать в единообразном виде:

$$\hat{S}_i'' + p_i \hat{S}_i' + q_i \hat{S}_i = f_i - \frac{h^2}{12} D_i + O(h^4), \tag{21}$$

где

$$D_i = \begin{cases} -(1 - 3hp_0) y_0^{IV} + 12y_1^{IV}, & i = 0, \\ -(1 - hp_1) y_1^{IV}, & i = 1, \\ y_i^{IV}, & i = 2, 3, \dots, N - 2 \\ -(1 - hp_{N-1}) y_{N-1}^{IV}, & i = N - 1, \\ -(1 - 3hp_N) y_N^{IV} + 12y_{N-1}^{IV}, & i = N. \end{cases} \tag{22}$$

Согласно лемме 1 можно заменить  $y_i^{IV}$  в (22) через (7b) без потери точности. В результате мы имеем

$$\hat{S}_i'' + p_i \hat{S}_i' + q_i \hat{S}_i = f_i - \frac{h^2}{12} \hat{D}_i + O(h^4), \quad i = 0, 1, \dots, N, \tag{23}$$

где

$$\hat{D}_i = \begin{cases} -(1 - 3hp_0) \Delta^2 S_0'' + 12\Delta^2 S_1'', & i = 0, \\ -(1 - hp_1) \Delta^2 S_1'', & i = 1, \\ \Delta^2 S_i'', & i = 2, 3, \dots, N - 2, \\ -(1 - hp_{N-1}) \Delta^2 S_{N-1}'', & i = N - 1, \\ -(1 - 3hp_N) \Delta^2 S_N'' + 12\Delta^2 S_{N-1}'', & i = N. \end{cases} \tag{24}$$

Пренебрегая  $O(h^4)$  членами в (23), мы приходим

$$\tilde{S}_i'' + p_i \tilde{S}_i' + q_i \tilde{S}_i = f_i - \frac{h^2}{12} \hat{D}_i, \quad i = 0, 1, \dots, N. \tag{25}$$

Таким образом, построение кубического сплайна, аппроксимирующего решения краевой задачи (1), (2), сводится к последовательному решению задач (5) и (25), т.е. сначала строится коллокационный кубический сплайн  $S(x)$ , удовлетворяющий уравнению (5). Потом строится сплайн  $\tilde{S}(x)$ , удовлетворяющий уравнению (25) и краевому условию

$$e_1 \tilde{S}_0 = \tilde{\gamma}_1, \quad e_2 \tilde{S}_N = \tilde{\gamma}_2, \tag{26}$$

где

$$\hat{\gamma}_1 = \gamma_1 + \frac{h\beta_1}{4} \Delta^2 S_0'', \quad \hat{\gamma}_2 = \gamma_2 + \frac{h\beta_2}{4} \Delta^2 S_N''.$$

Задача (25) отличается от задачи (5) лишь правой частью. Из Леммы 1.1 и Теоремы 2.1 непосредственно вытекает

**Следствие.** Справедливы соотношения:

$$\begin{aligned} y'_0 &= \tilde{S}'_0 - \frac{h^3}{4}\Delta^2 S''_0 + O(h^4), \\ y'_1 &= \tilde{S}'_1 + \frac{h^3}{12}\Delta^2 S''_1 + O(h^4), \\ y'_i &= \tilde{S}'_i + O(h^4), \quad i = 2, \dots, N-2, \\ y'_{N-1} &= \tilde{S}'_{N-1} + \frac{h^3}{12}\Delta^2 S''_{N-1} + O(h^4), \\ y'_N &= \tilde{S}'_N - \frac{h^3}{4}\Delta^2 S''_N + O(h^4), \end{aligned} \quad (27a)$$

$$\begin{aligned} y''_0 &= \tilde{S}''_0 + \frac{10S''_0 - 19S''_1 + 8S''_2 + S''_3}{12} + O(h^4), \\ y''_1 &= \tilde{S}''_1 - \frac{h}{12}\Delta^2 S''_1 + O(h^4), \\ y''_i &= \tilde{S}''_i + \frac{h^2}{12}\Delta^2 S''_i + O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2, \end{aligned} \quad (27b)$$

$$\begin{aligned} y''_{N-1} &= \tilde{S}''_{N-1} - \frac{h^2}{12}\Delta^2 S''_{N-1} + O(h^4), \\ y''_N &= \tilde{S}''_N + \frac{10S''_N - 19S''_{N-1} + 8S''_{N-2} + S''_{N-3}}{12} + O(h^4), \\ y_i &= \tilde{S}_i + O(h^4), \quad i = 0, 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (27c)$$

Справедлива следующая теорема:

**Теорема 2.** Для построенного сплайна  $\tilde{S}(x)$  справедливы соотношения (18), (19) и (20).

**Доказательство.** Пусть  $\tilde{S}(x)$  удовлетворяет (25) вместе соответствующими краевыми условиями. Используя Лемму 1.1, запишем (25) в виде

$$\tilde{S}''_i - y''_i - \frac{h^2}{12}y_i^{IV} + h^2 y_{i\pm 1}^{IV} + p_i(\tilde{S}'_i - y'_i - \frac{h^3}{4}y_i^{IV}) + q_i(\tilde{S}_i - y_i) = O(h^4), \quad i = 0, N, \quad (28a)$$

$$\tilde{S}''_i - y''_i - \frac{h^2}{12}y_i^{IV} + p_i(\tilde{S}'_i - y'_i + \frac{h^3}{12}y_i^{IV}) + q_i(\tilde{S}_i - y_i) = O(h^4), \quad i = 1, N-1, \quad (28b)$$

$$\tilde{S}''_i - y''_i + \frac{h^2}{12}y_i^{IV} + p_i(\tilde{S}'_i - y'_i) + q_i(\tilde{S}_i - y_i) = O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2. \quad (28c)$$

В уравнении (28a) знак  $+$  ( $-$ ) соответствует случаю  $i = 0$  ( $i = N$ ). Теперь вычтем уравнения (28) из уравнений (23). В результате мы имеем

$$\begin{aligned} (\hat{S} - \tilde{S})''_i + p_i(\hat{S} - \tilde{S})_i + q_i(\hat{S} - \tilde{S})_i &= O(h^4), \quad i = 0, 1, \dots, N, \\ e_1(\hat{S} - \tilde{S})_0 &= 0, \quad e_2(\hat{S} - \tilde{S})_N = 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Обозначим

$$\hat{S} - \tilde{S} = \sum_{j=-1}^{N+1} d_j B_j(x), \quad d_j = \hat{\alpha}_j - \tilde{\alpha}_j. \quad (30)$$

В терминах коэффициентов  $d_j$  уравнения (27) записывается в виде

$$\begin{cases} A_i d_{i-1} - C_i d_i + B_i d_{i+1} = O(h^6), & i = 0, 1, \dots, N, \\ (\theta_1 h - 3\beta_1) d_{-1} + 4h\theta_1 d_0 + (\theta_1 h + 3\beta_1) d_1 = 0, \\ (\theta_2 h - 3\beta_2) d_{N-1} + 4h\theta_2 d_N + (\theta_2 h + 3\beta_2) d_{N+1} = 0. \end{cases} \quad (29')$$

Матрица системы (29') имеет диагональное преобладание:

$$C_i - A_i - B_i = -\frac{h^2}{3} q_i > 0 \quad i = 0, 1, \dots, N.$$

Следовательно, система (29') имеет единственное решение и имеет место

$$d_i = O(h^4), \quad i = -1, 0, 1, \dots, N, N+1. \quad (31)$$

Из (30), с учётом (31), имеем

$$\hat{S}(x) - \tilde{S}(x) = O(h^4), \quad \forall x \in [a, b]. \quad (32)$$

С учётом (18) и (32) мы приходим

$$\tilde{S}_i - y_i = \tilde{S}_i - \hat{S}_i + \hat{S}_i - y_i = O(h^4), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (33a)$$

т.е. формула (18) справедлива  $O(h^4)$ . Из (28с) и (33a) следует, что

$$\left( \tilde{S}_i'' - y_i'' + \frac{h^2}{12} y_i^{IV} \right) + p_i (\tilde{S}_i' - y_i') = O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2. \quad (33b)$$

Далее, из (30) и (31), получаем

$$\begin{aligned} \hat{S}_i' - \tilde{S}_i' &= \frac{d_{i+1} - d_{i-1}}{2h} = O(h^3), \\ \hat{S}_i'' - \tilde{S}_i'' &= \frac{d_{i+1} - 2d_i + d_{i-1}}{h^2} = O(h^2) \quad i = 0, 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (34)$$

Если учесть (19) и (34), то ясно, что выражения в квадратных скобках в уравнении (33b) являются малыми величинами относительно  $h$  (по крайней мере  $O(h^2)$ ). Если  $p_i = 0$  в (33b), то

$$\tilde{S}_i'' - y_i'' + \frac{h^2}{12} y_i^{IV} = O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2. \quad (35)$$

Если же  $p_i \neq 0$ , то из (33b) следует, что выражения в квадратных скобках являются малыми величинами одного и того же порядка, а следовательно, согласно (33b) их порядок равен четвёртому, т.е.

$$\tilde{S}_i'' - y_i'' + h^2/12 \cdot y_i^{IV} = O(h^4), \quad \tilde{S}_i' - y_i' = O(h^4), \quad i = 2, 3, \dots, N-2.$$

Аналогичным образом из (28a) и (28b) непосредственно вытекают

$$\tilde{S}_i'' - y_i'' - \frac{h^2}{12} y_i^{IV} + h^2 y_{i\pm 1}^{IV} = O(h^4), \quad \tilde{S}_i' - y_i' - \frac{h^3}{4} y_i^{IV} = O(h^4), \quad i = \overline{0, N},$$

$$\tilde{S}_i'' - y_i'' - \frac{h^2}{12}y_i^{IV} = O(h^4), \quad \tilde{S}_i' - y_i' + \frac{h^3}{12}y_i^{IV} = O(h^4), \quad i = \overline{1, N-1}$$

соответственно. Теорема доказана полностью. □

С использованием пятиточечных формул

$$y_i'' = \frac{1}{12h}(-y_{i-2} + 16y_{i-1} - 30y_i + 16y_{i+1} - y_{i+2}) \tag{36}$$

$$y_i' = \frac{1}{12h}(y_{i-2} - 8y_{i-1} + 8y_{i+1} - y_{i+2}), \quad i = 2, 3, \dots, N-2 \tag{37}$$

можно построить разностную схему повышенной точности. Но, здесь возникают дополнительные вопросы об аппроксимации краевых условий и уравнения (1) в точках  $x = x_0, x_1, x_{N-1}, x_N$ . Полученная пятидиагональная система, к сожалению, не сводится к решению трёхдиагональной системы, как это имеет место в локально-кубической аппроксимации. В результате только значения решения в узлах сетки найдутся с точностью  $O(h^4)$ . В то время, как видно из Теоремы 3.1, кубический сплайн, построенный для решения задачи (1), (2) не только аппроксимирует значения решения, но и его производных. Любопытно отметить, что формула (16) для  $\hat{S}'(x_i)$  полностью совпадает с (37). Как следствие, выполнение соотношения (19) очевидно.

### 4. Результаты численных расчётов

Качество схемы проверено на ряде примеров. Рассмотрим тестовую задачу

$$u''(x) + \sin x \cdot u'(x) - xu(x) = 2(\cos x - 1 - x) \cdot \sin x, \quad x \in [0, \pi]$$

с краевыми условиями

$$u(0) = u(\pi) = 0 \tag{I}$$

и

$$u(x) - 2u'(x) = -4, \quad x = 0; \quad u(x) + \frac{1}{2}u'(x) = -1, \quad x = \pi. \tag{II}$$

Точное решение задачи имеет вид  $u(x) = 2 \sin x$ .

В табл. 1 приведены численные результаты, полученные на равномерной сетке.

**Таблица 1**

**Численные результаты, полученные на равномерной сетке**

Погрешности	I				II			
	$h = \pi/10$	$h/2$	$h/4$	$\sigma_i$	$h = \pi/10$	$h/2$	$h/4$	$\sigma_i$
$\varepsilon_0$	1.94-04	5.70-06	3.0-07	5.12	3.99-03	2.68-04	1.71-05	3.89
$\varepsilon_1$	0.68-02	4.11-04	2.53-05	4.05	4.74-03	3.32-04	2.21-05	3.83
$\varepsilon_2$	4.64-04	1.55-05	4.88-07	4.90	5.86-03	3.56-04	2.21-05	4.04

Использованы обозначения:

$$\varepsilon_0 = \max_{0 \leq i \leq N} |u_i - \tilde{S}_i|, \quad \varepsilon_1 = \max_{0 \leq i \leq N} \{u_i' - e_i(\tilde{S}', S'')\}, \quad \varepsilon_2 = \max_{0 \leq i \leq N} |u_i'' - \tilde{e}_i(\tilde{S}'', S'')|,$$

где

$$e_i(\tilde{S}', S'') = \begin{cases} \tilde{S}'_i - \frac{h^3}{12} \Delta^2 S''_i, & i = 0, N, \\ \tilde{S}'_i + \frac{h^3}{4} \Delta^2 S''_i, & i = 1, N - 1, \\ \tilde{S}'_i, & i = 2, 3, \dots, N - 2, \end{cases}$$

и

$$\tilde{e}_i(\tilde{S}'', S'') = \begin{cases} \tilde{S}''_i + \frac{1}{12}(10S''_0 - 19S''_1 + 8S''_2 + S''_3), & i = 0, \\ \tilde{S}''_i - \frac{h^2}{12} \Delta^2 S''_i, & i = 1, N - 1, \\ \tilde{S}''_i + \frac{h^2}{12} \Delta^2 S''_i, & i = 2, 3, \dots, N - 2, \\ \tilde{S}''_i + \frac{1}{12}(10S''_N - 19S''_{N-1} + 8S''_{N-2} + S''_{N-3}), & i = N. \end{cases}$$

В табл. 1 приведены коэффициенты Рунге  $\sigma_i = \log_2 \left| \frac{\varepsilon_i(h) - \varepsilon_i(h/2)}{\varepsilon_i(h/2) - \varepsilon_i(h/4)} \right|$ .

Из табл. 1 видно, что порядок сходимости всех величин  $\varepsilon_0, \varepsilon_1, \varepsilon_2$  равен  $O(h^4)$ . Они подтверждают теоретические выводы относительно порядка сходимости (Теорема 2, Следствие).

## 5. Заключение

В работе предложена сплайн-схема для численного решения краевых задач. Доказано, что построенный сплайн обладает такими же аппроксимативными свойствами, как локально-кубический сплайн. Следовательно, предлагаемая сплайн-схема может быть применена с успехом для численного решения краевых задач для ОДУ второго порядка.

## Литература

1. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. — М.: Наука, 1980.
2. Жанлав Т. О методе сплайн-аппроксимации решения обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. — 1992.
3. Жанлав Т. О трехточечной сплайн-схеме повышенной точности // ЖВМ и МФ. — 1991. — Т. 31, № 1. — С. 40–51.
4. Дронов С. Г., Лигун А. А. Об одном сплайн-методе решения краевой задачи // Укр. матем. журнал. — 1989. — Т. 41, № 5. — С. 703–707.
5. Жанлав Т. О представлении интерполяционных кубических сплайнов через B-сплайны // Методы сплайн-функций (Новосибирск). — 1981. — № 87. — С. 3–10.
6. Sablonnier P. Univariate spline quasi-interpolants and applications to numerical analysis // Rend. Sem. Mat. Univ. Pol. Torino. — 2005. — Vol. 63, No 3. — Pp. 211–222.
7. Zhanlav T., Mijiddorj R. The local integro cubic splines and their approximation properties // Appl. Math. Comput. — 2010. — Т. 216, № 7.
8. Zhu C. G., Wang R.-H. Numerical solution of Burgers equation by cubic B-spline quasi-interpolation // Appl. Math. Comput. — 2009. — Т. 208, № 1.
9. Zhu C., Kang W.-S. Numerical solution of Burgers-Fisher equation by cubic B-spline quasi-interpolation // Appl. Math. Comput. — 2010. — Vol. 216, No 9. — Pp. 2679–2686.

UDC 519.624.2

## Local-Cubic Spline for Approximate Solution of Boundary Value Problems

**T. Zhanlav\***, **R. Mijiddorj<sup>†</sup>***\* National University of Mongolia, Ulan-Bator, Mongolia**<sup>†</sup> Mongolian State University of Education, Ulan-Bator, Mongolia*

We have constructed an explicit local-cubic spline for the approximation of the smooth functions and have studied the behavior of the approximation. To solve numerically boundary value problems, a spline-scheme based on the properties of the local-cubic spline and the standard cubic spline collocation is proposed. The scheme is implemented by sequentially solving two tridiagonal systems, which allow to use the three-point sweep method and differ from each other only by matrix of the right-hand side of the equation. It indicates that this algorithm is efficient. The number of operations depends linearly on the number of grid nodes. It is proved that the constructed spline possesses the same approximation properties as the local-cubic spline. Thus, in this paper we actually considered the approximation of the solutions of the boundary value problems. The proposed scheme also allows to find the first and second derivatives of the solution of the boundary value problem on the uniform grid nodes of the fourth-order accuracy with respect to the step-size of the grid. The numerical experiments confirm the theoretical order of convergence. Due to good approximation properties and the simplicity of the algorithm implementation, the proposed method can be applied to solve numerically the boundary value problems for the second order ordinary differential equations, which often occur in mathematics, physics, and in the field of natural and engineering sciences.

**Key words and phrases:** boundary value problems, cubic spline, high accuracy

### References

1. Y. S. Zav'yalov, B. I. Kvasov, V. L. Miroschnichenko, *Methods of spline-functions*, Nauka Moscow, 1980, in Russian.
2. T. Zhanlav, *On a spline approximation method for solving ordinary differential equations*, in Russian (1992).
3. T. Zhanlav, *A high accuracy three-point spline scheme*, USSR Comput. Math. Math. Phys. 31 (1) (1991) 28–36.
4. S. G. Dronov, A. A. Ligon, *A certain spline method for solving a boundary-value problem*, Ukrainian Mathematical Journal 41 (5) (1989) 608–612.
5. T. Zhanlav, *B-representation of interpolatory cubic splines*, *Methods of spline-functions*, (Novosibirsk) (87) (1981) 3–10.
6. P. Sablonnier, *Univariate spline quasi-interpolants and applications to numerical analysis*, Rend. Sem. Mat. Univ. Pol. Torino 63 (3) (2005) 211–222.
7. T. Zhanlav, R. Mijiddorj, *The local integro cubic splines and their approximation properties*, Appl. Math. Comput. 216 (7).
8. C. G. Zhu, R.-H. Wang, *Numerical solution of burgers equation by cubic b-spline quasi-interpolation*, Appl. Math. Comput. 208 (1) (2009) 260–272.
9. C. Zhu, W.-S. Kang, *Numerical solution of burgers-fisher equation by cubic b-spline quasi-interpolation*, Appl. Math. Comput. 216 (9) (2010) 2679–2686.

## Символьно-численное решение уравнения Шредингера для вращающегося тела методом диагонализации

И. Н. Беляева\*, Н. А. Чеканов\*, Н. Н. Чеканова†

\* *Белгородский государственный национальный исследовательский университет  
Белгород, Россия*

† *Харьковский институт банковского дела Университета банковского дела НБУ  
Харьков, Украина*

Методом диагонализации найден спектр и собственные функции гамильтониана вращающегося квантового волчка с тремя произвольными моментами инерции в системе базисных функций, реализующей все четыре неприводимые представления группы  $D_2$ , относительно преобразований которой исходный гамильтониан не изменяется. Для собственных значений при небольших значениях вращательного момента  $J = 1, 2, 3, 4$  были получены аналитические формулы, а в случае произвольных значений вращательного момента представлены системы уравнений, которые с использованием современных компьютерных пакетов прикладных программ позволяют достаточно просто вычислить спектр и волновые функции асимметричного волчка. В качестве примера для вращательного момента  $J=50$  приведены вычисленные в среде MAPLE собственные значения и их зависимость от параметра асимметрии.

**Ключевые слова:** квантовое вращение произвольного твердого тела, гамильтониан, энергетический спектр, волновые функции, метод диагонализации, символьно-численные расчеты, математическое моделирование

### Введение

Вращательное движение, с точки зрения квантовой механики, является уникальным коллективным возбуждением в атомных ядрах. Этот тип движения был теоретически предсказан [1–3], затем обнаружен на основе экспериментальных данных по кулоновскому возбуждению атомных ядер. В настоящее время этому вопросу посвящено много публикаций (см. например, [4–8]). Вращательное движение в квантовых, в частности ядерных, системах может реализоваться только в том случае, если форма ядра является не сферической, а имеет вид некоторого сфероида с различными моментами инерции.

В связи с этим возникает задача вычисления энергетических уровней и их волновых функций квантового асимметричного волчка. На первом этапе таких вычислений естественно не учитывать взаимодействие вращательных и колебательных движений, так как последние возникают при намного больших энергиях.

Первые численные расчеты энергетических вращательных спектров асимметричного волчка для небольших значений полного углового момента с использованием непрерывных дробей были выполнены в работах, которые приведены в классической монографии [6]. Задача вычисления спектра асимметричного волчка рассматривалась в книгах [9, 10], где получены аналитические выражения для энергетических уровней с полным угловым моментом  $J = 1, 2, 3$ , а также в работе [11]. Имеются замечательные теоретические работы [12, 13], в которых задача на собственные значения гамильтониана асимметричного волчка приводится к уравнению Ламе, хотя сложность решения которого не уступает первоначальной задаче.

В настоящей работе для гамильтониана вращающегося асимметричного квантового объекта для нахождения его энергетического спектра и соответствующих волновых функций с учетом инвариантности гамильтониана относительно дискретной  $D_2$  группы получены уравнения, которые практически достаточно просто реализовать в современных математических пакетах символьно-численных вычислений, например, REDUCE, MAPLE.

## Постановка задачи

Требуется решить задачу на собственные значения для следующего оператора Шредингера

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{M}_1^2}{2I_1} + \frac{\hbar^2 \hat{M}_2^2}{2I_2} + \frac{\hbar^2 \hat{M}_3^2}{2I_3}, \quad (1)$$

где  $\hbar$  — постоянная Планка,  $I_1, I_2, I_3$  — главные моменты инерции относительно осей внутренней системы координат, а операторы  $\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3$  определены как [7]

$$\begin{aligned} \hat{M}_1 &= i \left( \frac{\cos \theta_3}{\sin \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \sin \theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_2} - \frac{\cos \theta_3}{\tan \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right), \\ \hat{M}_2 &= i \left( -\frac{\sin \theta_3}{\sin \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \cos \theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{\sin \theta_3}{\tan \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right), \quad \hat{M}_3 = -i \frac{\partial}{\partial \theta_3}, \end{aligned} \quad (2)$$

здесь  $\theta_1, \theta_2, \theta_3$  — углы Эйлера ( $0 \leq \theta_1 \leq 2\pi, 0 \leq \theta_2 \leq \pi, 0 \leq \theta_3 \leq 2\pi$ ), определяющие положение вращающегося волчка в пространстве в системе координат, жестко связанной с телом. Так как атомные ядра [7, 8] имеют вращательные спектры, то они могут быть описаны собственными значениями и функциями гамильтониана (1).

Операторы  $\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3$  удовлетворяют следующим правилам коммутации:

$$\hat{M}_m \cdot \hat{M}_k - \hat{M}_k \cdot \hat{M}_m = -i\hbar \sum_l \varepsilon_{mkl} \hat{M}_l, \quad m, k, l = 1, 2, 3; \quad i = \sqrt{-1}, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_{mkl}$  — полностью антисимметричный единичный тензор — и представляют собой проекции оператора полного момента импульса или, другими словами, полного вращательного момента асимметричного волчка  $\hat{J}$ , причем имеет место соотношение

$$\hat{J}^2 = \hat{M}_1^2 + \hat{M}_2^2 + \hat{M}_3^2. \quad (4)$$

Для краткости введем следующие обозначения

$$A \equiv \frac{\hbar^2}{2I_1}, \quad B \equiv \frac{\hbar^2}{2I_2}, \quad C \equiv \frac{\hbar^2}{2I_3} \quad (5)$$

и без потери общности наложим условие

$$A \geq B \geq C, \quad (I_1 \leq I_2 \leq I_3). \quad (6)$$

Тогда гамильтониан (1) примет выражение

$$\hat{H} = A\hat{M}_1^2 + B\hat{M}_2^2 + C\hat{M}_3^2, \quad (7)$$

которое перепишем в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(A + C)\hat{J}^2 + \frac{1}{2}(A - C)(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2), \quad (8)$$

где

$$\chi = \frac{2B - A - C}{A - C} \quad (9)$$

есть параметр, определяющий степень асимметрии волчка произвольной формы.

Сделаем гамильтониан (7) безразмерным. Для этого введем подходящую при численных расчетах единицу измерения энергии:

$$\varepsilon_0 \equiv \frac{A + C}{2} = \frac{\hbar^2(I_1 + I_2)}{4I_1I_2}, \quad (10)$$

которая близка к величине первого вращательного уровня.

Тогда безразмерный гамильтониан асимметричного квантового тела вращения примет вид

$$\hat{H} = \hat{J}^2 + \frac{A - C}{A + C}(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2) \quad (11)$$

или, если ввести второй параметр

$$\eta \equiv \frac{A - C}{A + C}, \quad (12)$$

характеризующий относительную разность между наибольшим и наименьшим моментами инерции, то безразмерный гамильтониан, с которым будем производить дальнейшие вычисления, запишется как

$$\hat{H} = \hat{J}^2 + \eta(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2). \quad (13)$$

При заданном соотношении между величинами  $A$  и  $C$ , т. е. для определенного значения параметра  $\eta$ , вращательный спектр и собственные функции гамильтониана (13) будут зависеть от единственного параметра  $\chi$  асимметрии. Меняя величину  $B$ , которая заключена между  $A$  и  $C$ , можно получить всевозможные формы твердого эллипсоида: от вытянутой ( $B = C$ ) при  $\chi = -1$  до сплюснутой ( $A = B$ ) при  $\chi = 1$ . При  $\chi = 0$  получаем наиболее несимметричную форму вращающегося эллипсоида ( $A + C = 2B$ ). Второй параметр  $\eta$  меняется в пределах от  $\eta = 0$ , если выполняется равенство  $A = C$  (при этом, конечно, имеют место равенства  $A = B = C$ , что соответствует твердому телу в виде шара), до  $\eta = 1$ , если величина  $A \rightarrow \infty$  ( $I_1 \rightarrow 0$ ).

Самосопряженный дифференциальный оператор (13) можно представить в виде суммы невозмущенного оператора  $\hat{H}_0$  и возмущения  $V$ :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad \hat{H}_0 = \hat{J}^2, \quad V = \eta(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2). \quad (14)$$

## Основные уравнения

Таким образом, наша исходная задача сводится к нахождению безразмерных собственных значений  $\varepsilon$  и собственных функций  $\psi_J$  дифференциального оператора (14), то есть к решению уравнения Шредингера:

$$(\hat{H}_0 + V - E)\psi_J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = 0. \quad (15)$$

Для заданного полного момента  $J$  решение уравнения (15) будем искать в виде разложения по следующему полному набору ортогональных функций:

$$\psi_J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sum_j \sum_K C_K^{(j)} \cdot \varphi_{JK}^{(j)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad (16)$$

где

$$\varphi_{JK}^{(j)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_{J,K}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + j\varphi_{J,-K}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)], j = \pm 1, K \geq 0, \quad (17)$$

с нормировкой

$$\iint\int \varphi_{J'K'}^{(j)*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \varphi_{JK}^{(j)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \sin \theta_2 d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 = \delta_{JJ'} \delta_{KK'} \delta_{jj'} (1 + j \delta_{K,0}), \quad (18)$$

причем квантовое число  $K$  принимает только целые положительные значения  $K = 0, 1, 2, \dots, J-1, J$  при данном целом положительном числе  $J$ .

Функции  $\varphi_{JK}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  являются ортонормированными собственными функциями оператора шарового волчка  $\hat{H}_0 = \hat{J}^2$  и, как известно (см., например, [7, 10]), определяются через обобщенные сферические функции или функции Вигнера  $D_{MK}^J(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$  следующим образом:

$$\varphi_{JK}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^J(\theta_1, \theta_2, \theta_3). \quad (19)$$

Для функций Вигнера имеют место следующие уравнения:

$$\hat{J}^2 D_{MK}^J = J(J+1) D_{MK}^J, \hat{M}_3 D_{MK}^J = K D_{MK}^J, \hat{M}_3' D_{MK}^J = M D_{MK}^J, \quad (20)$$

здесь  $\hat{M}_3'$  есть оператор третьей проекции оператора полного момента  $\hat{J}$  в неподвижной системе координат [7], а квантовые числа  $K$  и  $M$  являются проекциями полного вращательного момента  $J$  на третьи оси внутренней и неподвижной систем координат соответственно.

Вычисление левой части уравнения (15) с функциями (16) проще произвести с помощью операторов  $\hat{M}_{(+)}$  и  $\hat{M}_{(-)}$ , для которых известны соотношения [10]:

$$\begin{aligned} \hat{M}_{(+)} D_{MK}^J &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(J-K)(J+K+1)} D_{M,K+1}^J, \\ \hat{M}_{(-)} D_{MK}^J &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(J+K)(J-K+1)} D_{M,K-1}^J, \end{aligned} \quad (21)$$

$$\hat{M}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{M}_{(-)} - \hat{M}_{(+)}), \hat{M}_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{M}_{(-)} + \hat{M}_{(+)}). \quad (22)$$

Используя выражения (21) и (22), находим

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= J(J+1) \varphi_{JK}^{(j)}, \hat{M}_3 \varphi_{JK}^{(j)} = K \varphi_{JK}^{(j)}, \\ \hat{M}_1^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= \alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} + \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)}, \\ \hat{M}_2^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= -\alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} - \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\alpha(K) \equiv \frac{1}{4} \sqrt{(J+K+1)(J+K+2)(J-K-1)(J-K)}, \quad (24)$$

$\alpha(K) = 0$ , если  $K = \pm J$  и  $\alpha(-K) = 0$ , если  $K = J+1, K = J+2$ .

Подставляя выражения (23) в основное уравнение (15), получим

$$\sum_{j,K} C_K^{(j)} [(A(J,K) - \varepsilon) \varphi_{JK}^{(j)} + B(J,K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} + B(J,-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)}] = 0, \quad (25)$$

где для простоты записи введены обозначения:

$$\begin{aligned} A(J, K) &\equiv J(J+1)\left(1 + \frac{\eta}{2}(1+\chi)\right) - \frac{1}{2}\eta K^2(3+\chi), \\ B(J, K) &\equiv \eta(1-\chi)\alpha(K). \end{aligned} \quad (26)$$

Уравнение (25) умножим слева на функцию  $\varphi_{J'K'}^{(j)*}$  и проинтегрируем по всем переменным  $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ . Учитывая условие ортогональности (18) базисных функций (17), получим следующее уравнение относительно неизвестных коэффициентов  $C_K^{(j)}$  и собственных значений  $\varepsilon$ :

$$\begin{aligned} (A(J, K) - \varepsilon)(1 + j\delta_{K,0})C_K^{(j)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(j)} + \\ + B(J, -K-2)C_{K+2}^{(j)} + jB(J, K-2)C_{2-K}^{(j)} = 0, \end{aligned} \quad (27)$$

которое представим следующим образом

$$\begin{aligned} (A(J, K) - \varepsilon)(1 + j\delta_{K,0})C_K^{(j)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(j)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(j)} + j\tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(j)} = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\tilde{B}(J, K) \equiv B(J, -K) = \eta(1-\chi)\alpha(-K). \quad (29)$$

Таким образом, решение задачи на собственные значения (16) свелось к решению однородной системы линейных уравнений относительно неизвестных величин  $C_K^{(j)}$ . В силу однородности системы (27) она имеет нетривиальное решение только при определенных значениях  $\varepsilon$ , составляющих спектр исходного оператора (14).

## Классификация состояний. Основные уравнения в матричном виде

Дифференциальный оператор (14) не изменяется при преобразованиях группы симметрии  $D_2$ , кроме тождественного элемента, содержит три операции поворотов на угол  $\pi$  вокруг трех декартовых осей координат. Как известно [10], [9], группа  $D_2$  имеет четыре неприводимых представления, которые обозначаются как  $A, B_1, B_2, B_3$ . Ниже из анализа уравнения (27) будет видно, что выбор базисных функций в виде (17) реализует указанные четыре неприводимые представления группы  $D_2$ , в соответствии с которыми будут классифицированы собственные состояния асимметричного волчка.

Действительно, непосредственно видно, что основное уравнение (27) распадается на две независимые однородные линейные системы по отношению к неизвестным коэффициентам  $C_K^{(+)}$  и  $C_K^{(-)}$ :

$$\begin{aligned} (j = +1) : \quad (A(J, K) - \varepsilon)(1 + \delta_{K,0})C_K^{(+)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(+)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(+)} = 0, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} (j = -1) : \quad (A(J, K) - \varepsilon)(1 - \delta_{K,0})C_K^{(+)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(+)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(+)} = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

В свою очередь, каждая из систем (30)–(31) распадается еще на две в зависимости от четности проекции  $K$  углового момента  $J$ . Для краткости письма введем обозначения:

$$a_K \equiv A(J, K), b_K \equiv B(J, K), \tilde{b}_K \equiv \tilde{B}(J, K) \quad (32)$$

и представим получаемые системы из систем (30)–(31) в матричном виде. Вначале выпишем соответствующие матрицы в зависимости от четности полного вращательного момента и типа симметрии состояний группы  $D_2$ .

Если  $J$  — четное число, то имеем следующие матрицы:

$$A = \begin{matrix} & (j = +1) \\ \left\| \begin{array}{ccccc} a_0 - \varepsilon & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, & (33) \end{matrix}$$

$$B_3 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \quad (34)$$

$$B_1 = \begin{matrix} & (j = -1) \\ \left\| \begin{array}{ccccc} a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_6 & a_8 - \varepsilon & b_8 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, & (35) \end{matrix}$$

$$B_2 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_6 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|. \quad (36)$$

Матрица  $A$  для состояний  $A$ -типа имеет размерность  $J/2+1$ , а матрицы  $B_1$ –,  $B_2$ – и  $B_3$  для состояний  $B_1$ –,  $B_2$ –,  $B_3$ -типов —  $J/2$ .

Если же  $J$  — нечетное число, то

$$(j = +1)$$

$$\bar{B}_1 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_0 - \varepsilon & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \tag{37}$$

$$\bar{B}_2 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, \tag{38}$$

$$\bar{A} = \begin{matrix} (j = -1) \\ \left\| \begin{array}{ccccc} a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_6 & a_8 - \varepsilon & b_8 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \end{matrix} \tag{39}$$

$$\bar{B}_3 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_6 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|. \tag{40}$$

Матрица  $\bar{A}$  для состояний  $A$ -типа имеет размерность  $(J-1)/2$ , а матрицы  $\bar{B}_1$ -,  $\bar{B}_2$ - и  $\bar{B}_3$  для состояний  $B_1$ -,  $B_2$ -,  $B_3$ - типов –  $(J+1)/2$ .

При получении матриц (33)–(40) приняты во внимание соотношения  $b_K = \tilde{b}_{K+2}$ ,  $b_{2k+1} = \tilde{b}_{2k+3}$  и  $b_0 = \tilde{b}_0$ , которые следуют из определения (29).

Теперь запишем системы алгебраических уравнений, которые следуют из уравнений (30)–(31), в матричном виде, используя матрицы (33)–(40).

Если полный вращательный момент четный:  $J = 0, 2, 4, \dots$ , то имеем следующие четыре независимые однородные системы уравнений относительно неизвестных коэффициентов  $C_K^{(j)}$ :

$$AC_A^{(+)} = 0, B_1C_{B_1}^{(-)} = 0, B_2C_{B_2}^{(-)} = 0, B_3C_{B_3}^{(+)} = 0, \tag{41}$$

где

$$\begin{aligned}
 C_A^{(+)} &= (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \\
 C_{B_1}^{(-)} &= (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T, \\
 C_{B_2}^{(-)} &= (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \\
 C_{B_3}^{(+)} &= (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T
 \end{aligned} \tag{42}$$

есть многомерные векторы, а знак « $T$ » обозначает операцию транспонирования.

Если полный вращательный момент нечетный:  $J = 1, 3, 5, \dots$ , то получаем системы:

$$\bar{A}C_A^{(-)} = 0, \bar{B}_1C_{B_1}^{(+)} = 0, \bar{B}_2C_{B_2}^{(+)} = 0, \bar{B}_3C_{B_3}^{(-)} = 0, \tag{43}$$

где

$$\begin{aligned}
 C_A^{(-)} &= (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, C_6^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \\
 C_{B_1}^{(+)} &= (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T, \\
 C_{B_2}^{(+)} &= (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \\
 C_{B_3}^{(-)} &= (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T.
 \end{aligned} \tag{44}$$

Матричные элементы матриц  $A, B_1, B_2, B_3$  (четные  $J$ ) и  $\bar{A}, \bar{B}_1, \bar{B}_2, \bar{B}_3$  (нечетные  $J$ ) содержат величину  $\varepsilon$  как параметр.

#### Частные случаи: $J = 1, 2, 3, 4$

I. Пусть  $J = 1$ . Состояний  $A$ -типа в этом случае нет, так как получается матрица нулевого размера, а для состояний  $B_1$ -,  $B_2$ -,  $B_3$ -типов, соответственно, имеем уравнения:

$$(a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} = 0, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} = 0, \tag{45}$$

из которых с учетом определений (24), (26), (29) и (32) находим безразмерные собственные значения  $\varepsilon$ :

$$\varepsilon(B_1) = 2\left(1 + \frac{\eta(1 + \chi)}{2}\right), \quad \varepsilon(B_2) = 2, \quad \varepsilon(B_3) = (2 - \eta + \eta\chi). \tag{46}$$

Вспомня единицу измерения энергии (10), которая равна  $\varepsilon_0 = \frac{A+C}{2}$ , находим размерные собственные значения  $E$  асимметричного волчка для момента  $J = 1$ :

$$\begin{aligned}
 E(B_1) &= \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_1) = A + B, \\
 E(B_2) &= \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_2) = A + C, \quad E(B_3) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_3) = B + C.
 \end{aligned} \tag{47}$$

II. Пусть  $J = 2$ . Из системы алгебраических уравнений для состояний  $A$ -типа

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} = 0 \end{cases} \tag{48}$$

находим два собственных значения состояний из равенства нулю определителя

$$\left\| \begin{array}{cc} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{array} \right\| = 0, \tag{49}$$

что приводит к квадратному уравнению

$$(6 + 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon)(6 - 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon) - 3\eta^2(1 - \chi)^2 = 0, \tag{50}$$

из которого находим

$$\varepsilon_{1,2}(A) = 3(2 + \eta\chi) \pm \eta\sqrt{3(4\eta - \chi)}. \tag{51}$$

Для состояний  $B_{1-}$ ,  $B_{2-}$ ,  $B_{3-}$ -типов, соответственно, имеем уравнения:

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} = 0, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} = 0, \tag{52}$$

из которых находим три собственных значения:

$$\varepsilon(B_1) = 6 - 3\eta + \eta\chi, \quad \varepsilon(B_2) = 6 + 4\eta\chi, \quad \varepsilon(B_3) = 6 + 3\eta + 4\eta\chi. \tag{53}$$

Размерные собственные значения для состояний  $A$ -типа определяются из уравнения

$$E^2 - 4(A + B + C)E + 12(AB + AC + BC) = 0, \tag{54}$$

откуда получаем

$$E_{\pm}(A) = 2(A + B + C) \pm 2\sqrt{(A + B + C)^2 - 3(AB + AC + BC)} = 0, \tag{55}$$

а для  $B_{1-}$ ,  $B_{2-}$ ,  $B_{3-}$ -типов состояний:

$$E(B_1) = A + B + 4C, \quad E(B_2) = A + 4B + C, \quad E(B_3) = 4A + B + C. \tag{56}$$

III. Пусть  $J = 3$ . Состояние  $A$ -типа описывается уравнением

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \tag{57}$$

а состояния  $B_{1-}$ ,  $B_{2-}$ ,  $B_{3-}$ -типов, соответственно, следующими системами уравнений:

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} = 0, \end{cases} \tag{58}$$

$$\begin{cases} (a_1 + \tilde{b} - \varepsilon_1)C_1^{(+)} + b_1C_3^{(+)} = 0, \\ b_1C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} + b_1C_3^{(-)} = 0, \\ b_1C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0. \end{cases}$$

Собственные значения  $A$ -,  $B_{1-}$ ,  $B_{2-}$ ,  $B_{3-}$ -типов находятся из уравнений:

$$a_2 - \varepsilon = 0, \quad \begin{vmatrix} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \tag{59}$$

$$\begin{vmatrix} b_1 & a_3 - \varepsilon & a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & b_1 & a_3 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0,$$

из которых, принимая во внимание определения (24), (26), (29), (32) коэффициентов  $a_K$  и  $b_K$ , находим безразмерные собственные значения:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(A) &= 12 + 4\eta\chi, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_1) &= (12 + 5\eta\chi + 3\eta) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 - 6\chi + 6}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_2) &= (12 + 2\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{\chi^2 + 15}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_3) &= (12 - 3\eta + 5\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 + 6\chi + 6}.
 \end{aligned} \tag{60}$$

Для размерных собственных значений (50) можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned}
 E(A) &= 4(A + B + C), \\
 E_{1,2}(B_1) &= (5(A + B) + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + C^2 + AB - AC - BC}, \\
 E_{1,2}(B_2) &= (5(A + C) + 2B) \pm 2\sqrt{4(A - C)^2 + B^2 + AC - AB - BC}, \\
 E_{1,2}(B_3) &= (5(B + C) + 2A) \pm 2\sqrt{4(B - C)^2 + A^2 + BC - AC - AB}.
 \end{aligned} \tag{61}$$

Если переписать полученные результаты (51) через моменты инерции согласно определениям (4), то выражения (51) для собственных значений при  $J = 1, 2, 3$  совпадают с формулами, приведенными в книгах [9, 10].

IV. Пусть  $J = 4$ . В этом случае состояния  $A$ -,  $B_1$ -,  $B_2$ -,  $B_3$ -типов описываются, соответственно, следующими системами алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + b_2C_4^{(+)} = 0, \\ b_2(a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(+)} = 0, \end{cases} \begin{cases} (a_2 - \varepsilon_1)C_2^{(-)} + b_2C_4^{(-)} = 0, \\ b_2C_2^{(-)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(-)} = 0, \end{cases} \tag{62}$$

$$\begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} + b_1C_3^{(-)} = 0, \\ b_1C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0, \end{cases} \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} + b_1C_3^{(+)} = 0, \\ b_1C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0. \end{cases}$$

Безразмерные три собственные значения  $A$ -типа находятся из уравнения  $\varepsilon^3 - 20\varepsilon^2(\eta\chi - 3) - 16\varepsilon(4\eta^2\chi^2 - 13\eta^2 + 50\eta\chi + 75) - 320(9\eta^3\chi - 4\eta^2\chi^2 + 13\eta^2 - 25\eta\chi - 25) = 0$ , а собственные значения  $B_1$ -,  $B_2$ -,  $B_3$ -типов — из уравнений

$$\begin{aligned}
 \varepsilon^2 - 10(\eta\chi - \eta + 4)\varepsilon - 200\eta + 200\eta\chi + 9\eta^2\chi^2 - 63\eta^2 - 90\eta^2\chi + 400 &= 0, \\
 \varepsilon^2 - 20(\eta\chi + 2)\varepsilon + 4(100\eta\chi + 16\eta^2\chi^2 - 7\eta^2 + 100) &= 0, \\
 \varepsilon^2 - 10(\eta\chi + \eta + 4)\varepsilon + 200\eta + 200\eta\chi + 9\eta^2\chi^2 - 63\eta^2 - 90\eta^2\chi + 400 &= 0.
 \end{aligned} \tag{63}$$

Решения квадратных уравнений (57) последовательно равны:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{1,2}(B_1) &= 5(\eta\chi - \eta + 4) \pm 2\sqrt{2\eta\sqrt{2\chi^2 + 5\chi + 11}}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_2) &= 10(\eta\chi + 2) \pm 2\eta\sqrt{9\chi^2 + 7}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_3) &= 5(\eta\chi + \eta + 4) \pm 2\sqrt{2\eta\sqrt{2\chi^2 - 5\chi + 11}}.
 \end{aligned} \tag{64}$$

Таким образом, при полном вращательном моменте  $J = 4$  имеется девять состояний. Собственные значения в исходных единицах измерения, например для  $B_1$ -типа, имеют вид

$$E_{1,2}(B_1) = 5(A + B + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + 9(C^2 + AB - AC - BC)}, \tag{65}$$

а размерные собственные значения  $B_2$ -,  $B_3$ -типов получаются из выражения (59) циклической подстановкой  $A \rightarrow B, B \rightarrow C$  и  $C \rightarrow B$ .

## Результаты численных расчетов

Для больших значений полного момента  $J$  и произвольных моментов инерции вычисление собственных значений в аналитическом виде невозможно, поэтому приходится прибегать к численным расчетам.

В настоящей работе была составлена программа ASYMMMA в среде MAPLE, с помощью которой можно вычислить собственные значения (энергетический спектр) и собственные функции для произвольных величин  $J$ .

Ниже на рис. 1–3 представлены результаты численных расчетов энергетических уровней всех четырех типов для состояний с вращательным моментом  $J = 50$ .

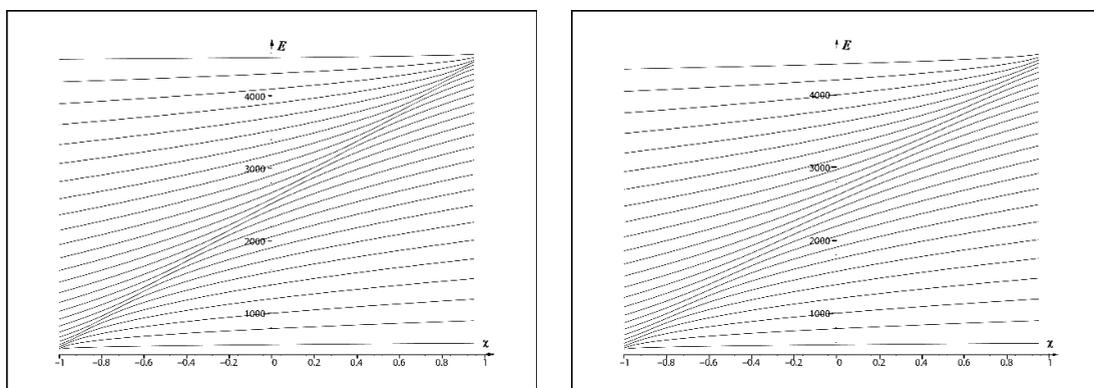


Рис. 1. Зависимость энергетических уровней (слева направо)  $A$ -типа,  $B_1$ -типа от величины параметра асимметрии  $\chi$  при полном угловом моменте  $J = 50$

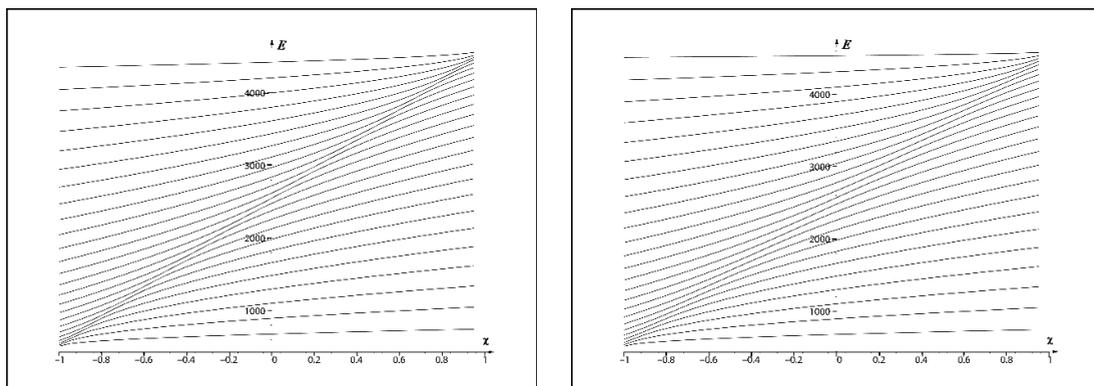
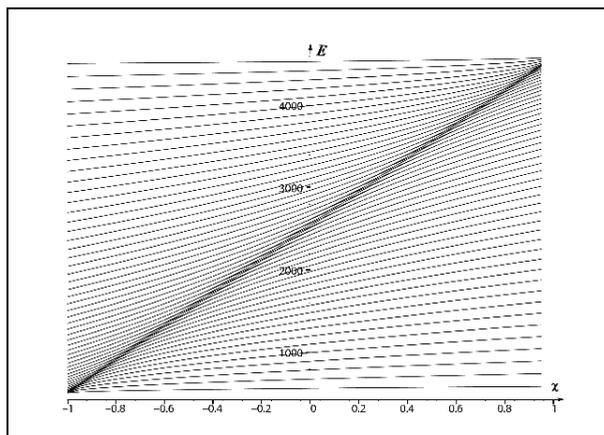


Рис. 2. Зависимость энергетических уровней (слева направо)  $B_2$ -типа и  $B_3$ -типа от величины параметра асимметрии  $\chi$  при полном угловом моменте  $J = 50$



**Рис. 3.** Зависимость энергетических уровней  $A$ -,  $B_1$ -,  $B_2$ -,  $B_3$ - типа от величины параметра асимметрии  $\chi$  при полном угловом моменте  $J = 50$

## Заключение

В работе рассмотрена задача на собственные значения для дифференциального оператора, описывающего вращение асимметричного квантового волчка. Учитывая свойства симметрии этого оператора, найдены подходящие базисные функции, которые реализуют все четыре его неприводимых представления и на их основе проведена классификация собственных значений и функций.

Получены соответствующие системы уравнений, описывающие вращение твердого тела с произвольным значением углового момента. Для малых значений углового момента  $J \leq 4$  получены формулы для вычисления собственных значений, а для больших значений углового момента была составлена программа ASYMMMA в среде MAPLE, с помощью которой можно вычислить собственные значения (энергетический спектр) и собственные функции асимметричного квантового волчка.

## Литература

1. *Rainwater J.* Background for the Spheroidal Nuclear Model Proposal // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
2. *Bohr A.* Rotational Motion in Nuclei // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
3. *Mottelson B.* Elementary Modes of Excitation in the Nucleus // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
4. *Слив Л. А.* Рубежи ядерной физики // УФН. — 1981. — Т. 133, № 2. — С. 337–350.
5. *Павличенков И. М.* Аномалии вращательных спектров деформированных атомных ядер // УФН. — 1983. — Т. 133, № 2. — С. 193–222.
6. *Bohr A., Mottelson B.* Nuclear structure. — New York, Amsterdam: W. A. Benjamin, 1974. — Vol. 2, Nuclear deformations.
7. *Eisenberg J., Greiner W.* Nuclear Theory. — Amsterdam–London: North-Holland Publishing Company, 1970. — Vol. 1, Nuclear models, Collective and Single-Particle Phenomena.
8. *Давыдов А. С.* Возбужденные состояния атомных ядер. — М.: Атомиздат, 1967.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: ГИФМЛ, 1963.
10. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. — М.: Физматгиз, 1963.

11. Лукач И., Смородинский Я. А. Волновые функции асимметричного волчка // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 57. — С. 13–42.
12. Uzer T. Exact Quantization of Certain Rotational Hamiltonians and the Quantum Eilerbproblem // Phys. Lett. A. — 1993. — Vol. 183, No 1. — Pp. 51–55.
13. Антонов В. А., Кондратьев Б. П. О квантовании вращения твердого тела // Журнал технической физики. — 2006. — Т. 76, № 8. — С. 9–12.

UDC 519.711.3; 517.958

## Symbolic-Numeric Solution the Shroedinger Equation for Rotating Solid Body by Diagonalisation Method

I. N. Belyaeva\*, N. A. Chekanov\*, N. N. Chekanova†

\* *Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*

† *Kharkov Institute of Banking of National University of Bankin, Kharkov, Ukraine*

The eigenvalues and wave functions of the rotational quantum top Hamiltonian with a different three moment of inertia by the diagonalisation method in the basis function system that realized the all four irreducible representation of the discrete D2 group are obtained. For the low rotational moment value  $J = 1, 2, 3, 4$  the analytical formulae are calculated. But in the case of any rotational moment values the systems of equation are obtained that with the mean of the modern computer program packages allow very easy to calculate the spectrum and eigenfunctions of asymmetric quantum top. As example, for the rotational moment value  $J=50$  by the help of Maple system eigenvalues are performed and its dependence versus of the parameter asymmetry are presented.

**Key words and phrases:** quantum rotation of solid body, Hamiltonian, energy spectrum, wave functions, diagonalisation method, symbolic-numeric calculations, mathematical modelling

## References

1. J. Rainwater, Background for the spheroidal nuclear model proposal, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
2. A. Bohr, Rotational motion in nuclei, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
3. B. Mottelson, Elementary modes of excitation in the nucleus, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
4. L. A. Sliv, Boundaries of nuclear physics, UFN 133 (2) (1981) 337–350, in Russian.
5. I. M. Pavlichenkov, Anomalies rotating spectra of deformed nuclei, UFN 133 (2) (1983) 193–222, in Russian.
6. A. Bohr, B. Mottelson, Nuclear structure, Vol. 2, Nuclear deformations, W. A. Benjamin, New York, Amsterdam, 1974.
7. J. Eisenberg, W. Greiner, Nuclear Theory, Vol. 1, Nuclear models, Collective and Single-Particle Phenomena, North-Holland-Publishing Company, Amsterdam–London, 1970.
8. A. S. Davydov, Exited states of atomic nuclei, Atomizdat, Moscow, 1967, in Russian.
9. L. D. Landau, E. M. Lifshits, Quantum mechanics. Nonrelativistic theory., GIFML, Moscow, 1963, in Russian.
10. A. S. Davydov, Quantum mechanics, Fizmatgiz, Moscow, 1963, in Russian.
11. I. Lukach, Y. A. Smorodinskiy, Wave functions of asimmetric top, JETF 57 (1969) 13–42, in Russian.
12. T. Uzer, Exact quantization of certain rotational hamiltonians and the quantum eilerbproblem, Phys. Lett. A. 183 (1) (1993) 51–55.
13. V. A. Antonov, B. P. Kondratyev, Quantization rotation of solid body, Journal of technical physics 76 (8) (2006) 9–12, in Russian.

## Об одном методе сглаживания двумерной поверхности

П. Г. Любин

*ФБГОУ ВО МГТУ «СТАНКИН», Москва, Россия*

Регрессионный анализ ставит перед собой задачу отыскания функциональной зависимости между наблюдаемыми величинами изучаемого процесса. При этом исходные данные являются реализацией случайной величины, поэтому рассматривается зависимость математического ожидания. Такую задачу можно решать путём «сглаживания» исходных данных. Под сглаживанием понимается попытка удаления шума и несущественных фрагментов при сохранении наиболее важных свойств структуры данных, то есть результат подобен математическому ожиданию. Сглаживание данных, как правило, осуществляется путём параметрической или непараметрической регрессии. В случае параметрической регрессии необходимы априорные знания о форме уравнения регрессии. Большинство исследуемых данных, однако, невозможно параметризовать. С этой точки зрения непараметрическая и полупараметрическая регрессии представляются лучшим подходом к решению задачи сглаживания. Целью исследования ставилось разработка и реализация алгоритма быстрого сглаживания двумерных данных. Для достижения этой цели были проанализированы предыдущие работы в данной области и разработан свой подход, улучшающий предыдущие. В результате, в данной работе представлен алгоритм, который быстро и с минимальным потреблением памяти очищает данные от «шума» и «несущественных» частей. Для подтверждения «эффективности» алгоритма проведены сравнения с другими общепризнанными подходами на смоделированных и реальных данных. Результаты этих сравнений также приведены в статье.

**Ключевые слова:** непараметрическая регрессия, двумерное сглаживание, штрафные сплайны, сглаживающие сплайны, скользящий контроль, двумерное дискретное косинусное преобразование

### 1. Постановка задачи

При анализе некоторого реального процесса исходные данные зашумлены, из-за чего необходимо «сглаживание». Под сглаживанием понимается попытка фильтрации шума или несущественных фрагментов при сохранении наиболее важных свойств структуры данных. Рассмотрим следующую модель

$$y = \hat{y} + \varepsilon, \quad (1)$$

где  $\varepsilon$  — гауссов белый шум. Предполагается, что функция  $f(x)$  должна быть гладкой, т.е. иметь непрерывные производные до некоторого порядка. Сглаживание данных, как правило, осуществляется путём параметрической или непараметрической регрессии. В случае параметрической регрессии необходимы некоторые априорные знания о форме уравнения регрессии, которое достаточно хорошо описывало бы исходные данные. Большинство наблюдаемых данных, однако, невозможно параметризовать с точки зрения задания функции  $f(x)$  в аналитическом виде. С этой точки зрения непараметрическая и полупараметрическая регрессии являются лучшим подходом к решению задачи (1). Одним из классических подходов к сглаживанию является использование различных модификаций метода наименьших квадратов со штрафом. Он впервые был продемонстрирован вначале 1920-х в работе [1] и подробно разобран в книге [2]. Эта техника заключается в минимизации некоторого функционала, который уравнивает «адекватность» и «гладкость» оценки

$$F(\hat{y}) = RSS + \lambda \cdot P(\hat{y}) = \|\hat{y} - y\|^2 + \lambda \cdot P(\hat{y}), \quad (2)$$

где  $\|\cdot\|$  — евклидова норма. Параметр  $\lambda$  является вещественным положительным числом, контролирующим гладкость решения: при его возрастании гладкость  $\hat{y}$  также растёт. Когда штрафная функция записана в виде интеграла квадрата производной  $p$ -порядка, регрессия называется сглаживающим сплайном [1, 3, 4]. Другим простым и эффективным подходом к решению задачи (1) является квадратичный вид штрафной функции в следующей форме [5]:

$$P(\hat{y}) = \|D\hat{y}\|^2, \quad (3)$$

где  $D$  — трёхдиагональная матрица следующего вида

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 & & & \\ 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & -2 & 1 \\ & & & & 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Данная статья является продолжением исследований автора, затронутых в статьях [6, 7], а также некоторые идеи почерпнуты из статьи [8].

## 2. Одномерное сглаживание

Пусть имеются равноотстоящие точки  $\{x_i\}_{1 \leq i \leq n}$  и значения функции отклика в этих точках следующего вида

$$y_i = f(x_i) + \varepsilon_i, \quad (4)$$

где  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ . Пусть  $\hat{y}$  является оценкой функции  $f(x_i)$ . Тогда минимизация выражения (2) приводит к следующему уравнению

$$\hat{y} = H(\lambda) \cdot y, \quad (5)$$

где  $H(\lambda) = (I + \lambda \cdot D^T D)^{-1}$  представляет собой проекционную матрицу, а  $\lambda$  — это сглаживающий параметр. Сглаживающий параметр выбирается путём минимизации функционала следующего вида

$$GCV(\lambda) = \frac{RSS(\lambda)/n}{(1 - \text{Tr}(H(\lambda))/n)^2}. \quad (6)$$

Такой подход называется методом скользящего контроля (crossvalidation). При равноотстоящих наблюдениях можно использовать свойства матрицы  $D$ , с помощью которых можно упростить вычисления  $GCV$ . Это свойство заключается в возможности разложить матрицу  $D$  в следующее произведение  $UGU^T$ , где матрица  $U$  является унитарной и представляет собой дискретное косинусное преобразование [9]. Тогда  $RSS$  можно переписать в следующем виде:

$$\begin{aligned} RSS &= \|\hat{y} - y\|^2 = \|H(\lambda) \cdot y - y\|^2 = \left\| \left( (I + \lambda \cdot D^T D)^{-1} - I \right) \cdot y \right\|^2 = \\ &= \left\| \left( U \cdot (I + \lambda \cdot \Gamma^2)^{-1} - I \right) \cdot U^T \cdot y \right\|^2 = \sum_i \left( \frac{1}{1 + \lambda \gamma_i^2} - 1 \right)^2 \cdot DCT_i^2(y). \end{aligned}$$

В таком случае функционал (6) принимает более удобный для вычислений вид:

$$GCV(\lambda) = \frac{n \cdot \sum_i \left( \frac{1}{1+\lambda\gamma_i^2} - 1 \right)^2 \cdot DCT_i^2(y)}{n - \sum_i \left( \frac{1}{1+\lambda\gamma_i^2} \right)^2}. \quad (7)$$

### 3. Двумерное сглаживание

Пусть имеются равномерная сетка  $\{(x_{1,i}, x_{2,j})\}_{1 \leq i \leq n_1, 1 \leq j \leq n_2}$  и значения функции отклика в узлах этой сетки следующего вида

$$y_{i,j} = f(x_{1,i}, x_{2,j}) + \varepsilon_{i,j}, \quad (8)$$

где  $\varepsilon_{i,j} \sim N(0, \sigma^2)$ . В таком случае можно представить значения функции отклика в виде матрицы  $Y$ , в которой  $y_{i,j}$  является элементом  $i$ -й строки  $j$ -го столбца. Тогда сглаженные значения будем обозначать как  $\hat{Y}$ . Введём операцию *vec*, которая заключается в записи матрицы в виде вектор-столбца путём выкладывания столбцов матрицы друг за другом. Очевидно, что оценка  $vec(\hat{Y})$  имеет следующий вид:

$$vec(\hat{Y}) = (H_{x_2} \otimes H_{x_1}) \cdot vec(Y) = H_{x_2, x_1} \cdot vec(Y), \quad (9)$$

где  $H_{x_1}, H_{x_2}$  — проекционные матрицы соответствующего измерения. Очевидно, что эти проекционные матрицы имеют следующий вид

$$H_{x_i} = (I_{n_i} + \lambda_i D_{n_i}^T D_{n_i})^{-1}, \quad i = 1, 2. \quad (10)$$

Применяя вышеизложенный подход и свойства тензорного произведения [10], выражение (9) можно упростить следующим образом

$$\begin{aligned} \hat{y} &= (H_{x_2} \otimes H_{x_1}) \cdot y = (I_{n_2} + \lambda_2 D_{n_2}^T D_{n_2})^{-1} \otimes (I_{n_1} + \lambda_1 D_{n_1}^T D_{n_1})^{-1} \cdot y = \\ &= U_{x_2} \cdot \left( \frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \cdot U_{x_2}^T \otimes U_{x_2} \cdot \left( \frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \cdot U_{x_2}^T \cdot y = \\ &= U_{x_2} \otimes U_{x_1} \cdot \left( \frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \otimes \left( \frac{1}{1 + \lambda_1 \gamma_{x_1}^2} \right) \cdot U_{x_2}^T \otimes U_{x_1}^T \cdot y = U_{x_2, x_1} \cdot \Gamma_{x_2, x_1} \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y. \end{aligned}$$

Для автоматического поиска оптимальных значений  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$  предлагаем также использовать  $GCV$  адаптированный для двумерного случая:

$$GCV(\lambda_1, \lambda_2) = \frac{RSS/n}{(1 - \text{Tr}(H_{x_2, x_1})/n^2)}. \quad (11)$$

Принимая во внимание свойство следа тензорного произведения матриц [10], получаем  $\text{Tr}(H_{x_2, x_1}) = \sum \frac{1}{1+\lambda_1\gamma_{x_1}^2} \cdot \sum \frac{1}{1+\lambda_2\gamma_{x_2}^2}$ . Очевидно, что основным затратным местом в части вычислений является расчёт  $RSS$ , так как требуется вычисление  $\hat{y}$  для всех комбинаций  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Данный расчёт можно упростить следующим образом:

$$\begin{aligned} RSS &= \|\hat{y} - y\|^2 = \|H_{x_2, x_1} \cdot y - y\|^2 = \|(H_{x_2, x_1} - I_n) \cdot y\|^2 = \\ &= \|U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y\|^2 = \\ &= (U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y)^T \cdot (U_{x_2, x_1} \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n) \cdot U_{x_2, x_1}^T \cdot y) = \end{aligned}$$

$$= (DCT_2 \cdot y)^T \cdot (\Gamma_{x_2, x_1} - I_n)^2 \cdot DCT_2 \cdot y = \sum (\gamma_{x_2, x_1} - 1)^2 \cdot (DCT_2 \cdot y)^2.$$

Здесь  $DCT_2$  — это двумерный аналог дискретного косинусного преобразования. Из упрощённой формулы видно, что преобразование необходимо выполнить один раз, а меняются только значения  $\gamma_{x_2, x_1}$  в зависимости значений  $\lambda_1$  и  $\lambda_2$ . Данный подход реализован на языке R. Для демонстрации преимуществ изложенного подхода выполнены численные эксперименты: на искусственно сгенерированных данных и на реальных данных.

#### 4. Численный эксперимент

Для проведения эксперимента смоделирована следующая задача: взята функция  $\sin(2\pi(x - 0, 5)^3) \cdot \cos(4\pi y)$  и зашумлена случайными значениями из нормального распределения  $N(0, 0, 2^2)$  (рис. 1). Сглаживание проводилось изложенным подходом и при помощи пакета MGCV [11], в котором реализовано сглаживание штрафными сплайнами, в том числе и для многомерного случая с использованием тензорного произведения базовых функций. Ниже приведена таблица с результатами сглаживания на различных сетках.

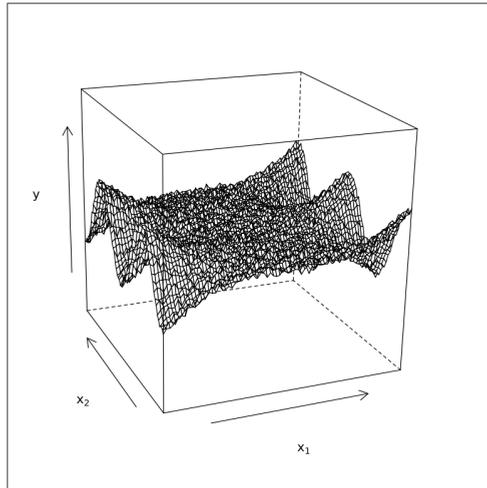


Рис. 1. Функция  $\sin(2\pi(x - 0, 5)^3) \cdot \cos(4\pi y)$  с шумом

Таблица 1  
 Результаты сглаживания смоделированной задачи на разных сетках

Параметр	R-сплайны с ДКП	GAM с $10^2$ узлами	GAM с $20^2$ узлами
RSS	9, 488243	11, 72485	9, 87163
MSE	0, 001483	0, 001832	0, 00154
Корреляция с истин. значениями	0, 9993394	0, 996919	0, 9991624
Время оцен. (с)	1, 941	10, 237	29, 875

Для демонстрации практического применения вышеизложенного подхода взяты данные о смертности в России. Данные взяты из открытого источника [12] и содержат наблюдения за 1959–2010 годы по возрастам 0–110. Оценивание проводилось на части данных, которая относится к старшим возрастам (50–101, рис. 2). К этим годам выборка достаточно сильно уменьшается, в результате чего наблюдения содержат ошибки и выбросы, из-за которых не видно общей картины происходящих процессов. Таким образом, анализируемые данные представляют собой равномерно расположенные значения коэффициентов смертности на сетке размерности  $52 \times 52$ . Сглаживание проводилось изложенным подходом, пакетом *MGCV* и параметрической моделью Ли-Картера, которая стала классической при оценивании двумерной поверхности смертности. Далее приведена таблица с результатами оценивания.

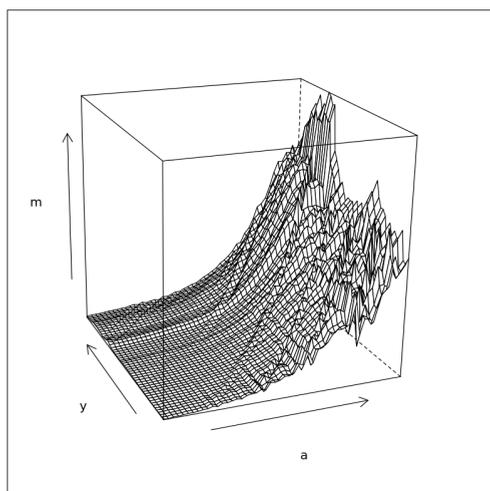


Рис. 2. Коэффициенты смертности населения России старше 50 лет с 1959 г. по 2010 г.

Таблица 2

Результаты сглаживания двумерной поверхности смертности России

Параметр	P-сплайны с ДКП	Модель Ли-Картера	GAM с $12^2$ узлами
RSS	0,21637	18,5092	0,41395
MSE	0,0000905	0,0077379	0,0001731
Время оцен. (с)	0,49	1,194	4,185

## 5. Заключение

Из приведённых результатов очевидно, что подход описанный в данной статье более эффективен, так как имеет большую скорость сглаживания и малое потребление памяти. Также хочется отметить, что при росте выборки скорость оценивания растёт незначительно при сохранении качества оценки. Результатами проделанной работы являются:

1. получены выражения для двумерного случая с учётом двух параметров сглаживания;
  2. полученный подход реализован на языке R;
  3. выполнено сравнение подхода с другими аналогичными подходами и моделями.
- В последующих работах предполагается рассмотрение следующих возможностей:
- расширение метода на многомерный случай;
  - использование других распространённых критериев выбора сглаживающих параметров, например, *BIC* или *AIC*;
  - использование более быстрого метода поиска минимального значения функционала *GCV*.

## Литература

1. *Whittaker E. T.* On a New Method of Graduation // *Proceedings of the Edinburgh Mathematical Society.* — 1923. — Vol. 41. — Pp. 62–75.
2. *Wahba G.* Spline Models for Observational Data. — Society for Industrial Mathematics, 1990. — ISBN 9780898712445.
3. *Schoenberg I. J.* Spline Functions and the Problem of Graduation // *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America.* — 1964. — Vol. 52. — Pp. 947–950.
4. *Takezawa K.* Introduction to Nonparametric Regression. — Wiley & Sons, Inc., 2005. — ISBN 9780471745839.
5. *Weinert H. L.* Efficient Computation for Whittaker–Henderson Smoothing // *Computational Statistics & Data Analysis.* — 2007. — Vol. 52. — Pp. 959–974.
6. *Щетинин Е. Ю., Любин П. Г.* Робастный алгоритм построения сглаживающих сплайнов // *Научное обозрение.* — 2015. — Т. 1. — С. 86–94.
7. *Любин П. Г., Щетинин Е. Ю.* Стохастические модели сглаживания и прогнозирования коэффициентов смертности // *Научное обозрение.* — 2015. — Т. 18. — С. 147–155.
8. *Xiao L., Li Y., Ruppert D.* Fast Bivariate P-splines: the Sandwich Smoother // *Journal of the Royal Statistical Society.* — 2013. — Vol. 75. — P. 577–599.
9. *Garcia D.* Robust Smoothing of Gridded Data in One and Higher Dimensions with Missing Values // *Computational Statistics & Data Analysis.* — 2010. — Vol. 54. — P. 1167–1178.
10. *Seber G.* A Matrix Handbook for Statisticians. — Wiley-Interscience, 2007. — ISBN 9780471748694.
11. *Wood S.* MGCV: Mixed GAM Computation Vehicle with GCV/AIC/REML Smoothness Estimation. — R package version 1.8.10. <https://cran.r-project.org/web/packages/mgcv/index.html>, r package version 1.8.10.
12. The Human Mortality Database. — <http://www.mortality.org/>.

UDC 519.234

## On a Method of Two-Dimensional Smoothing P. G. Lyubin

*Moscow State Technology University “STANKIN”, Moscow, Russia*

Regression analysis has the task of finding a functional relationship between the observed values the studied process. The raw data is the realization of a random variable, it is therefore considered dependent on the expectation. This problem can be solved by “smoothing” the raw data. Smoothing is the process of removing the noise and insignificant fragments while preserving the most important properties of the data structure. It is similar to finding the expectation of data. Data smoothing usually attained by parametric and nonparametric regression. The nonparametric regression requires a prior knowledge of the regression equation form. However,

most of the investigated data cannot be parameterized simply. From this point of view, non-parametric and semiparametric regression represents the best approach to smoothing data. The aim of the research is development and implementation of the fast smoothing algorithm of two-dimensional data. To achieve this aim previous works in this area have been analyzed and its own approach has been developed, improving the previous ones. As a result, this paper presents the algorithm that quickly and with minimal memory consumption cleanses the data from the “noise” and “insignificant” parts. To confirm the “efficiency” of the algorithm the comparisons with other generally accepted approaches were carried out on simulated and real data with other generally accepted approaches. The results of these comparisons are also shown in the paper.

**Key words and phrases:** nonparametric regression, two-dimensional estimation, penalized splines, smoothing splines, cross-validation, discrete cosine transform

## References

1. E. T. Whittaker, On a New Method of Graduation, Proceedings of the Edinburgh Mathematical Society 41 (1923) 62–75.
2. G. Wahba, Spline Models for Observational Data, Society for Industrial Mathematics, 1990.
3. I. J. Schoenberg, Spline Functions and the Problem of Graduation, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 52 (1964) 947–950.
4. K. Takezawa, Introduction to Nonparametric Regression, Wiley & Sons, Inc., 2005.
5. H. L. Weinert, Efficient Computation for Whittaker-Henderson Smoothing, Computational Statistics & Data Analysis 52 (2007) 959–974.
6. E. Y. Shetinin, P. G. Lyubin, Robust Smoothing with Splines, Science Review 1 (2015) 86–94, in Russian.
7. P. G. Lyubin, E. Y. Shetinin, Stochastic Models of Mortality Estimation, Science Review 18 (2015) 147–155, in Russian.
8. L. Xiao, Y. Li, D. Ruppert, Fast Bivariate P-splines: the Sandwich Smoother, Journal of the Royal Statistical Society 75 (2013) 577–599.
9. D. Garcia, Robust Smoothing of Gridded Data in One and Higher Dimensions with Missing Values, Computational Statistics & Data Analysis 54 (2010) 1167–1178.
10. G. Seber, A Matrix Handbook for Statisticians, Wiley-Interscience, 2007.
11. S. Wood, MGCV: Mixed GAM Computation Vehicle with GCV/AIC/REML Smoothness Estimation, r package version 1.8.10.  
URL <https://cran.r-project.org/web/packages/mgcv/index.html>
12. The human mortality database, last visited on 25.02.2016.  
URL <http://www.mortality.org/>

# Kuryshkin-Wodkiewicz Model of Quantum Measurements for Atoms and Ions with One Valence Electron

A. V. Gorbachev, L. A. Sevastianov, A. V. Zorin

*Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia*

The structural form of the Kuryshkin-Wodkiewicz model of quantum measurement was developed in detail for quantum Kepler problem. For more complex objects such quantum structure is unknown. At the same time, a standard (non-structural) model of quantum measurement proposed by Holevo-Helstrom is suitable for any quantum object. The aim of this work is to spread the structural model of quantum measurement to a broader class of quantum objects — a model of quantum measurements of optical spectra of atoms and ions with one valence electron.

In this work the Kuryshkin-Wodkiewicz model with implementation of Weyl-Kuryshkin quantization rule is applied to the extended quantum Kepler problem of quantum systems with one valence electron, such as alkali metal atoms. The proof of the consistency of the model is based on two Kato theorems about compact perturbations of operators. In the proof process the explicit form of the discrete spectrum of the valence electron for various spectral series was achieved with dependence on the serial parameters of the disturbance spectrum of an isolated object in the process of quantum measurement.

**Key words and phrases:** quantum measurement models, quantization rule, a relatively compact perturbation of the observable operator, perturbation of the observable discrete spectrum

## 1. Introduction

The energy spectrum  $E_n = -\frac{R}{2n^2}$  of the valence electron in a hydrogen atom is described by a discrete spectrum of the Hamiltonian operator  $\hat{H} = -\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{r}$  of the quantum Kepler problem with the Hamiltonian function  $H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{|r|}$ . The measured spectrum of the valence electron, except from the operator, is also dependent on the quantum state  $\hat{\rho}$  of the probe of the measuring instrument, i.e. It is described by a discrete spectrum of the measured observable  $O_\rho(H) = O_W(H * W_\rho)$  [1, 2].

The constructive form of the Kuryshkin-Wodkiewicz model of quantum measurement is developed in detail for quantum Kepler problem [3] and quantum oscillator [4, 5]. For more complex objects such quantum construction is unknown. At the same time, a standard (non-constructive) model of quantum measurements of Holevo-Helstrom is suitable for any quantum object, any quantum system [6, 7].

The aim of this work is to spread the constructive model (of quantum measurements) of Kuryshkin-Wodkiewicz to a wider class of quantum objects, to construct a model of quantum measurements of optical spectra of atoms and ions with one valence electron. Hydrogen-like atoms - a hydrogen atom, muonic atoms, ions of different charges with a single electron. We are interested in the atoms of the alkali metals, consisting of a core (a nucleus together with all the filled electron shells) and the valence electron and ions with one valence electron.

## 2. Hydrogen-Like Atoms

Theory of the hydrogen atom in quantum mechanics is a theory of an electron in a hydrogen atom. Its energy spectrum under theoretical analysis where electron is treated

as an isolated quantum object has a very simple form

$$E_n = -\frac{R}{2n^2} \quad (1)$$

The measurement process violates the isolated state of the quantum object, transferring it to an open state, forming a part of a complex system: “object+probe” [8–11].

The measured energy spectrum of an electron in a hydrogen atom is perturbed with respect to the spectrum (1):

$$\tilde{E}_n = E_n + \delta E_n \quad (2)$$

There is a description problem (of constructing a mathematical model) of the measured values of the optical spectrum of the hydrogen atom. This model is a Weyl–Kuryshkin quantization rule equipped with: a mixed quantum state  $\{\varphi_k\}$  of the probe, smoothed (perturbed) classic observed  $A * W_{\{\varphi_k\}}(q, p)$ , applied to it the Weil quantization rule  $O_{\{\varphi_k\}}(A) = O_W(A)$ . Next step will be a theoretical study of the spectrum of this operator and the numerical calculation of parts of the discrete spectrum affiliated with  $\{\varphi_k\}$  [12–15].

First remark. While the experimental data is obtained with respect to a valence electron spin, the model not considers the spin state. As a result, at the current stage the studied model can not fully describe quantum interaction. However, on the one hand, it is adequate for the averaged over spin experimental values, on the other hand a model can be generalized taking into account the electron spin by Stratonovich-Weyl quantization [16–18].

For the hydrogen atom model is verified with relative accuracy  $\sim 10^{-16}$  (there is no special achievement in it). Before discussing the dependence of the perturbations  $\delta E_n$  of the hydrogen atom under the influence of the measuring device with a quantum probe in the state  $\{\varphi_k\}$  let us recall what is known about the discrete energy spectrum of the valence electron in an isolated atom of an alkali metal with a serial number  $Z$ .

### 3. The Energy Spectrum of the Valence Electrons in the Atoms of the Alkali Metals

For atoms with more than one electron, even for the most simple, Schrodinger equation can not be solved immediately neither with analytical nor numerical methods. For this reason, the study of the spectra of many-electron atoms is based on an approximate model. The most appropriate approach turned out to be the one [19] that maintains an idea of the individual state of the electron in an atom, and the whole state of the atom is determined by a set of states of the electrons with respect to their interaction. This approach helps us obtain some general information about the system’s possible energy levels for a given atom and their mutual arrangement.

General description of states of electrons in the atom is based on the assumption that each electron moves in an effective centrally symmetric field produced by the nucleus and all the other electrons. More detailed analysis focuses on the non-central part of the electrostatic and magnetic interaction of electrons. In the theory of atomic spectra these interactions are usually described as small corrections to the centrally symmetric field using methods of perturbation theory. Perturbation does not change the number of possible states of the system [19]. The calculation of the energy parameters can find practical use in various aspects of the atomic spectra theory. The key value of this calculations is determination of the wave functions. They are used in the calculation of the probabilities of radiative transitions, the effective excitation cross-sections and other characteristics of the atom. This is the main problem of the calculation of many-electron atoms, as energy levels can be obtained (and with high accuracy) from experiments.

In the approximation of a complete separation of the electronic variable the probability of radiative transitions  $\kappa \rightarrow \kappa'$  between states  $\kappa$  and  $\kappa'$  can be expressed [19] through one-electron radial integrals

$$R_{\kappa\kappa'} = \int P_{\kappa}(r) r P_{\kappa'}(r) dr. \tag{3}$$

Therefore, the main task in the calculation of the transition probabilities is to find radial functions  $P_{\kappa}(r)$ ,  $P_{\kappa'}(r)$ . For all of the atoms and ions, with the exception of those with a single electron, radial functions can be found only by approximate methods. Main methods of approximate calculation of the radial functions are different versions of variational methods and semi-empirical methods. All semi-empirical methods use of experimental values of energy levels.

Variational methods provide good approximation quality of functions  $P_{\kappa}(r)$  in the area of values  $r$ , which is the most significant in the calculation of energy. For large values of  $r$  these functions can be very inaccurate. With the help of semi-empirical methods it is easier to get functions  $P_{\gamma}(r)$ , exact at large  $r$ , i.e. just in the region which is most important for the calculation of transition probabilities. Therefore, much more simple semi-empirical method gives a better agreement with experiment (the accuracy of calculation of the transition probabilities) than the method of self-consistent field [19].

In the method of self-consistent field wave functions are calculated simultaneously with eigenvalues of the system of differential equations, with energy parameters  $E_{\kappa}$ . Different approach is more preferable for calculating the radiation transition probabilities. We can pre-define values  $E_{\kappa}$  and lookup such single-electron radial functions  $P_{\kappa}(r)$  that calculated values  $E_{\kappa}$  coincided with pre-defined. In this case the problem of self-consistent defined by the system of equations field is usually replaced by a single equation for the optical electron in an effective field. This equation has the form

$$\left\{ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{\kappa}(r) - E_{\kappa} \right\} P_{\kappa}(r) = 0. \tag{4}$$

The energy parameter  $E_{\kappa}$  is equal to the difference between the atom energy  $E_a$  and the “frozen” atomic core energy  $E_i$  [19]. Accuracy of functions  $P_{\kappa}(r)$  largely depends on how close the selected value  $E_{\kappa}$  is to the true value of the difference  $E_a - E_i$ . In the semi-empirical method, the energy parameter  $E_{\kappa}$  is equal to the experimental value of the ionization potential  $I_{\kappa}$ . Even for the alkaline earth atoms, and even more so for the alkali, it is the most appropriate to apply the semi-empirical method of calculations [19]. When choosing an effective potential  $V_{\kappa}(r)$  different approaches are available. However, in all cases, functions  $P_{\kappa}(r)$  have good asymptotic because the behavior of these functions for large  $r$  is determined by pre-selection of  $E_{\kappa}$ .

One of approaches is to choose potential  $V_{\kappa}(r)$  as a function of some fitted parameter whose value satisfies both boundary conditions. (In general case, the selected value  $E_{\gamma}$  does not belong to eigenvalue of the equation (4), an thus it does not necessary have to satisfy both of the boundary conditions:  $P_{\gamma}(0) = 0$ ,  $P_{\gamma}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ ).

#### 4. Generalization of Kuryskin-Wodkiewicz Model on the Valence Electrons of Alkali Metal Atoms

The spectral composition of terms (excluding spin interaction, relativistic corrections, etc.) of an isolated hydrogen atom can be easily calculated:

$$E_n = -\frac{R}{2n^2}. \tag{5}$$

Upon splitting of the terms, they acquire corrections  $\delta E_{nl}$  so that

$$E_{nl} = -\frac{R}{2n^2} + \delta E_{nl}. \quad (6)$$

In the measurement process (due to “interaction” with the quantum probe) the measured energy spectrum (after the projection on the original Hilbert space) becomes

$$E_{nl,\kappa} = -\frac{R}{2n^2} + \delta E_{nl} + \delta E_{\kappa}, \quad (7)$$

where  $\kappa$  is the multi-index of the quantum probe state. This is a standard approach for the hydrogen atom.

The spectral composition of terms of “hydrogen-like” alkali metals atoms is defined by the equation

$$E_{nl}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2}. \quad (8)$$

Upon splitting of the terms, they acquire corrections

$$E_{nl,mm_s}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2} + \delta E_{nl,mm_s}. \quad (9)$$

In the process of measuring the “measured” energy spectrum takes the form

$$E_{nl,mm_s,\kappa}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2} + \delta E_{nl,mm_s} + \delta E_{\kappa}. \quad (10)$$

There is no need to take into account the additional contributions of fine structure and hyperfine structure in the formula (6) and (9) of the measured values of observables – energy before generalization of the Weil–Kuryshkin quantization rules to the quantization rule of Kuryshkin-Stratonovich. Consequently, the measured values of the terms should be limited by the formulas

$$E_{n,\kappa}^1 = -\frac{R}{2n^2} + \delta E_{\kappa}^1 \quad (11)$$

and

$$E_{nl,\kappa}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2} + \delta E_{\kappa}^Z. \quad (12)$$

Moreover, contributions  $\delta E_{\kappa}^1$  and  $\delta E_{\kappa}^Z$  are obtained from the convolution  $V(r) * W_{\{\varphi_{\kappa}\}}(q, p)$ , where

$$V^1(r) = -\frac{1}{r} \quad (13)$$

and

$$V^Z(r) = -\frac{1}{r} + \frac{\alpha^Z}{r^2}. \quad (14)$$

As a result the quantization rule of Weil-Kuryshkin is adequate for the alkali metals to the same extent as the potential  $V_{\kappa}(r, \vartheta)$ , with respect to the small corrections to the centrally symmetric field of core.

### 5. The Model of Quantum Measurements of Kuryshkin-Wodkiewicz for Atoms and Ions of Alkali Metals

Recall the form

$$O_\rho(H) = \hat{H} + \sum_j a_j \left( \frac{1}{2b_j} + V_j(r, \cos \vartheta) \right)$$

of the Hamiltonian of hydrogen atom perturbed by the probe measurement in a quantum state

$$\hat{\rho} = \sum_j a_j |\psi_j(b_j)\rangle \langle \psi_j(b_j)|.$$

Therefore, perturbation of the potential  $V^1(r)$  measured by probe in the state  $\hat{\rho}$  has a form  $\delta V_\rho = \sum_j a_j V_j(b_j, r, \cos \vartheta)$  that is

$$O_\rho \left( -\frac{1}{r} \right) = O_W \left( \left( -\frac{1}{r} \right) * W_\rho(\vec{r}, \vec{p}) \right) = -\frac{1}{r} + \delta V_\rho(\vec{r}).$$

Ritz method makes it possible with the help of  $\delta V_\rho(\vec{r})$  to calculate  $\delta_\rho E_\kappa$  for the first spectral lines  $\delta_\rho \lambda_\kappa^N = (\lambda_\kappa^0 - \lambda_\kappa^1)^N$  through the calculations of eigenvalues of the Ritz matrix of dimension  $N$ . In the works [20–23] it is shown how to restore the state  $\hat{\rho}$  by disturbances  $\delta_\rho E_\kappa$ . Thus, on the perturbation  $\delta V_\rho(\vec{r})$  one can calculate  $\hat{\rho} = \sum_j a_j |\psi_j(b_j)\rangle \langle \psi_j(b_j)|$  such that

$$\left( -\frac{1}{r} \right) * W_\rho(\vec{r}, \vec{p}) = -\frac{1}{r} + \delta V_\rho(\vec{r}).$$

As a result, we get

**Theorem 1.** For any mixed state  $\hat{\rho} = \sum_j a_j |\psi_j(b_j)\rangle \langle \psi_j(b_j)|$  of a quantum probe there exists a unique perturbation  $\delta V_\rho(\vec{r})$  of potential  $V^1(\vec{r}) = -\frac{1}{r}$  being  $V^1(r)$ -compact and equal to zero at infinity. And vice versa, to any  $V^1(r)$ -compact and equal to zero at infinity disturbance  $\delta V_\rho(\vec{r})$  of potential  $V^1(r)$  corresponds the state  $\hat{\rho} = \sum_j c_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$

uniquely defined in a subspace  $H^N = \left\{ \sum_{j=1}^N c_j \psi_j \right\}$  of minimal dimension  $N$  in the Hilbert space  $L_2(\mathbb{R}^3)$ .

Let us use the result of Kato’s theorem [24]: If the operator  $O(H) = \hat{H} + V(\vec{r})$  of the potential  $V$  can be written as the sum of two functions, one of which is continuous and bounded, and the other is the square-integrable on  $\mathbb{R}^3$ , while  $V(\vec{r}) \xrightarrow{|\vec{r}| \rightarrow \infty} 0$ , then

$V$  is  $\hat{H}$ -compact. Any perturbation  $V_\kappa(r, \cos \vartheta)$  of the centrally symmetric field  $V^Z(r)$  in (14) in the problem (4) decreases at infinity, and thus according to Kato theorem  $V^Z + V_\kappa$  is  $\hat{H}$ -compact, vanishing at infinity. According to the Statement 1 for  $V_\kappa^Z(\vec{r}) = V^Z(r) + V_\kappa(r, \cos \vartheta)$  there is a state  $\hat{\rho}_\kappa^Z = \sum c_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$  defined uniquely in a subspace

$H^N = \left\{ \sum_{j=1}^N c_j \psi_j \right\}$  of minimal dimension  $N$  in the Hilbert space  $L_2(\mathbb{R}^3)$  such that

$(V^1 * W_{\rho_\kappa^Z})(\vec{r}, \vec{p}) = V_\kappa^Z(\vec{r})$ . Thus, for the measured Hamilton operator of a valence electron in the alkali metal atom the measured potential is:

$$V_{\kappa,\rho}^Z(\vec{r}) = (V_\kappa^Z * W_\rho)(\vec{r}, \vec{p}) = \{(V^1 * W_{\rho_\kappa^Z}) * W_\rho\}(\vec{r}, \vec{p}).$$

Hence, is valid

**Theorem 2.** *The quantization rule of Kuryshkin-Wodkiewicz applied to the valence electron in the alkali metal atom with an approximate pseudopotential  $V_\kappa^Z(\vec{r})$  been measured by the quantum probe in the state  $\hat{\rho} = \sum c_j |\psi_j\rangle \langle \psi_j|$  take the form of quantization rule of Kuryshkin-Weyl with the potential  $(V_\kappa^Z * W_\rho)(\vec{r})$ .*

**Corollary 1.** Quantum measurement by the quantum probe in the state  $\hat{\rho}$  of the energy spectrum of the valence electron in the alkali metal atom with state values

$$E_{nl}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2}$$

of (8), will result in measured value

$$E_{nl,\rho}^Z = -\frac{R}{2(n + \sigma_l^Z)^2} + \delta E_\rho^Z$$

of (12).

## 6. Conclusion

In [2, 3, 25, 26] of quantum measurements applied to the quantum problem of Kepler has been implemented. In previous works a particular modification the model of quantum measurement has been applied to the problem of quantum oscillator [4, 5]. In this paper the Kuryshkin-Wodkiewicz model with implementation of Weyl-Kuryshkin quantization rule [3, 25, 26] is applied to the quantum systems with one valence electron like alkali metal atoms Kuryshkin-Wodkiewicz model implementing quantization rule Weil-Kuryshkin, extended to the quantum system with one valence electron, such as alkali metal atoms. The proof of the consistency of the model is based on two Kato theorems [24]. The explicit form of the discrete spectrum of the valence electron for various spectral series, depending on the serial parameters of the disturbance spectrum of an isolated object in the process of quantum measurement was achieved.

## References

1. A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, Hydrogen-Like Atom with Nonnegative Quantum Distribution Function, Physics of Atomic Nuclei 70 (2007) 792–799.
2. A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, Kuryshkin-Wodkiewicz Quantum Measurement Model, Bulletin of PFUR. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics” 3 (2010) 98–103, in Russian.
3. L. A. Sevastianov, A. V. Zorin, A. V. Gorbachev, Pseudo-Differential Operators in the Operational Model of a Quantum Measurement of Observables, LNCS 7125 (2012) 174–181.
4. G. M. D’ariano, U. Leonhardt, H. Paul, Homodyne Detection of the Density Matrix of the Radiation Field, Physical Review A 52 (3) (1995) R1801.
5. G. M. D’ariano, Measuring Quantum States, in: Quantum Optics and the Spectroscopy of Solids, Springer, 1997, pp. 175–202.

6. A. S. Holevo, *Statistical Structure of Quantum Theory*, Vol. 67, Springer Science & Business Media, 2003.
7. C. W. Helstrom, Quantum Detection and Estimation Theory, *Journal of Statistical Physics* 1 (2) (1969) 231–252.
8. G. Ludwig, Attempt of an Axiomatic Foundation of Quantum Mechanics and More General Theories. III, *Communications in Mathematical Physics* 9 (1) (1968) 1–12.
9. E. B. Davies, J. T. Lewis, An Operational Approach to Quantum Probability, *Communications in Mathematical Physics* 17 (3) (1970) 239–260.
10. M. Ozawa, Quantum Reality and Measurement: A Quantum Logical Approach, *Foundations of Physics* 41 (3) (2011) 592–607.
11. M. Ozawa, Y. Kitajima, Reconstructing bohr’s reply to epr in algebraic quantum theory, *Foundations of Physics* 42 (4) (2012) 475–487.
12. A. V. Zorin, V. V. Kuryshkin, L. A. Sevastianov, Description of the Spectrum of a Hydrogen-Like Atom, *Bulletin of PFUR. Series Physics* 6 (1998) 62–66.
13. A. V. Zorin, Approximate Determination of States in Quantum Mechanics of Kuryshkin, *Bulletin of PFUR. Series Physics* 12 (2004) 81–87, in Russian.
14. A. V. Zorin, Method of Investigation of Essential and Discrete Spectra of Hamiltonian Operator of Hydrogenlike Atom in Quantum Mechanics of Kuryshkin, *Bulletin of PFUR. Series “Applied and Computer Mathematics”* 3 (1) (2004) 121–131, in Russian.
15. A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, N. P. Tretyakov, Computer Modeling of Hydrogen-Like Atoms in Quantum Mechanics with Nonnegative Distribution Function, *Programming and Computer Software* 33 (2) (2007) 94–104.
16. R. L. Stratonovich, On Distributions in Representation Space, *Soviet Physics. JETP* 4 (6) (1957) 891–898.
17. J. C. Varilly, J. Gracia-Bondia, The Moyal Representation for Spin, *Annals of Physics* 190 (1) (1989) 107–148.
18. M. Gadella, Moyal Formulation of Quantum Mechanics, *Fortschritte der Physik* 43 (3) (1995) 229.
19. I. I. Sobel’Man, R. A. Satten, An Introduction to the Theory of Atomic Spectra, *Physics Today* 27 (1974) 51.
20. L. A. Sevastianov, A. V. Zorin, Lower Bound Estimating Method of Eigenvalues of Differential Hamiltonian Operator in Quantum Mechanics of Kuryshkin, *Bulletin of PFUR. Series “Applied and Computer Mathematics”* 1 (1) (2002) 134–144, in Russian.
21. A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, G. A. Belomestny, E. B. Laveev, Quantum Systems Modeling by Methods of Computer Algebra, in: *Computer Algebra in Scientific Computing*, St.Petersburg.-Munche: TUM-Publ., 2004, pp. 497–506.
22. A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, G. A. Belomestny, Numerical Search for the States with Minimal Dispersion in Quantum Mechanics with Non-Negative Quantum Distribution Function, in: *Numerical Analysis and Its Applications*, Springer, 2004, pp. 613–620.
23. A. A. Gusev, A. V. Zorin, K. P. Lovetsky, N. P. Tretyakov, Numerical Investigation of the Discrete Spectrum of Hamiltonian Operators of the Hydrogen-Like Atoms in Kuryshkin’s Quantum Mechanics, *Bulletin of PFUR. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics”* 3 (2007) 76–84, in Russian.
24. R. D. Richtmyer, *Principles of Advanced Mathematical Physics*, Vol. 1, Springer, 1979.
25. A. V. Zorin, Computer Implementation of Quantum Measurements Model, in: *Information Technologies and Mathematical Modelling*, ITMM 2015. 14th International Scientific Conference, named after A.F. Terpigov, Anzhero-Sudzhensk, Russia, 2015, pp. 273–275.
26. L. A. Sevastianov, A. V. Zorin, A. V. Gorbachev, A Quantum Measurements Model of Hydrogen-Like Atoms in Maple, in: *Computer Algebra in Scientific Computing*, Springer, 2013, pp. 369–380.

УДК 519.62; 530.145; 519.614

## Модель квантовых измерений Курышкина-Вудкевича для атомов и ионов с одним валентным электроном

А. В. Горбачев, А. В. Зорин, Л. А. Севастьянов

*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

Конструктивная форма модели квантовых измерений Курышкина-Вудкевича детально разработана для квантовой задачи Кеплера. Для более сложных квантовых объектов такая конструкция неизвестна. В то же время стандартная (не конструктивная) модель квантовых измерений Холево-Хелстрема годится для любого квантового объекта. Целью данной работы является распространение конструктивной модели квантовых измерений на более широкий класс квантовых объектов — модель квантовых измерений оптического спектра атомов и ионов с одним валентным электроном.

В работе модель Курышкина-Вудкевича, реализующая правило квантования Вейля-Курышкина в приложении к квантовой задаче Кеплера, распространена на квантовые системы с одним валентным электроном, например, на атомы щелочных металлов. В основу доказательства состоятельности модели положены две теоремы Като о компактных возмущениях операторов. В ходе доказательства получены явные формулы дискретного спектра валентного электрона для различных спектральных серий, зависящие от сериальных параметров возмущения спектра изолированного объекта в процессе квантовых измерений.

**Ключевые слова:** квантовые модели измерения, правила квантования, относительно компактное возмущение наблюдаемого оператора, возмущение наблюдаемого дискретного спектра

## Литература

1. Zorin A. V., Sevastianov L. A. Hydrogen-Like Atom with Nonnegative Quantum Distribution Function // *Physics of Atomic Nuclei*. — 2007. — Vol. 70, issue 4. — Pp. 792–799.
2. Зорин А. В., Севастьянов Л. А. Модель квантовых измерений Курышкина-Вудкевича // *Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»*. — 2010. — Т. 3, вып. 1. — С. 98–103.
3. Sevastianov L. A., Zorin A. V., Gorbachev A. V. Pseudo-Differential Operators in the Operational Model of a Quantum Measurement of Observables // *LNCS*. — 2012. — Vol. 7125. — Pp. 174–181.
4. D'ariano G. M., Leonhardt U., Paul H. Homodyne Detection of the Density Matrix of the Radiation Field // *Physical Review A*. — 1995. — Vol. 52, No 3. — P. R1801.
5. D'ariano G. M. Measuring Quantum States // *Quantum Optics and the Spectroscopy of Solids*. — Springer, 1997. — Pp. 175–202.
6. Holevo A. S. *Statistical Structure of Quantum Theory*. — Springer Science & Business Media, 2003. — Vol. 67.
7. Helstrom C. W. Quantum Detection and Estimation Theory // *Journal of Statistical Physics*. — 1969. — Vol. 1, No 2. — Pp. 231–252.
8. Ludwig G. Attempt of an Axiomatic Foundation of Quantum Mechanics and More General Theories. III // *Communications in Mathematical Physics*. — 1968. — Vol. 9, No 1. — Pp. 1–12.
9. Davies E. B., Lewis J. T. An Operational Approach to Quantum Probability // *Communications in Mathematical Physics*. — 1970. — Vol. 17, No 3. — Pp. 239–260.
10. Ozawa M. Quantum Reality and Measurement: A Quantum Logical Approach // *Foundations of Physics*. — 2011. — Vol. 41, No 3. — Pp. 592–607.
11. Ozawa M., Kitajima Y. Reconstructing Bohr's reply to EPR in algebraic quantum theory // *Foundations of Physics*. — 2012. — Vol. 42, No 4. — Pp. 475–487.

12. *Zorin A. V., Kuryshkin V. V., Sevastianov L. A.* Description of the Spectrum of a Hydrogen-Like Atom // *Bulletin of PFUR. Series Physics*. — 1998. — Vol. 6, issue 1. — Pp. 62–66.
13. *Зорин А. В.* Приближенное отыскание состояний в квантовой механике Курьшкина // *Вестник РУДН. Серия «Физика»*. — 2004. — Т. 12. — С. 81–87.
14. *Зорин А. В.* Метод исследования существенного и дискретного спектров оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курьшкина // *Вестник РУДН. Серия «Прикладная и компьютерная математика»*. — 2004. — Т. 3, № 1. — С. 121–131.
15. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Tretyakov N. P.* Computer Modeling of Hydrogen-Like Atoms in Quantum Mechanics with Nonnegative Distribution Function // *Programming and Computer Software*. — 2007. — Vol. 33, No 2. — Pp. 94–104.
16. *Stratonovich R. L.* On Distributions in Representation Space // *Soviet Physics. JETP*. — 1957. — Vol. 4, No 6. — Pp. 891–898.
17. *Varilly J. C., Gracia-Bondia J.* The Moyal Representation for Spin // *Annals of Physics*. — 1989. — Vol. 190, No 1. — Pp. 107–148.
18. *Gadella M.* Moyal Formulation of Quantum Mechanics // *Fortschritte der Physik*. — 1995. — Vol. 43, No 3. — P. 229.
19. *Sobel'Man I. I., Satten R. A.* An Introduction to the Theory of Atomic Spectra // *Physics Today*. — 1974. — Vol. 27. — P. 51.
20. *Зорин А. В., Севастьянов Л. А.* Метод оценок снизу для собственных значений дифференциального оператора Гамильтона в квантовой механике Курьшкина // *Вестник РУДН. Серия «Прикладная и компьютерная математика»*. — 2002. — Т. 1, № 1. — С. 134–144.
21. *Quantum Systems Modeling by Methods of Computer Algebra / A. V. Zorin, L. A. Sevastianov, G. A. Belomestny, E. B. Laveev // Computer Algebra in Scientific Computing / St.Petersburg.-Munchen: TUM-Publ. — 2004. — Pp. 497–506.*
22. *Zorin A. V., Sevastianov L. A., Belomestny G. A.* Numerical Search for the States with Minimal Dispersion in Quantum Mechanics with Non-Negative Quantum Distribution Function // *Numerical Analysis and Its Applications*. — Springer, 2004. — Pp. 613–620.
23. *Численное исследование дискретного спектра оператора Гамильтона водородоподобного атома в квантовой механике Курьшкина / А. А. Гусев, А. В. Зорин, К. П. Ловецкий, Н. П. Третьяков // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»*. — 2007. — Т. 3, вып. 4. — С. 76–84.
24. *Richtmyer R. D.* Principles of Advanced Mathematical Physics. — Springer, 1979. — Vol. 1.
25. *Zorin A. V.* Computer Implementation of Quantum Measurements Model // *Information Technologies and Mathematical Modelling, ITMM 2015. 14th International Scientific Conference, named after A.F. Terpigov / Anzhero-Sudzhensk, Russia. — 2015. — Pp. 273–275.*
26. *Sevastianov L. A., Zorin A. V., Gorbachev A. V.* A Quantum Measurements Model of Hydrogen-Like Atoms in Maple // *Computer Algebra in Scientific Computing / Springer*. — 2013. — Pp. 369–380.

---

# Теоретическая механика

UDC 534.1

## Stability of Non-Linear Vibrations of Doubly Curved Shallow Shells

R. G. Mukharlyamov\*, M. Amabili†, R. Garziera‡, K. Riabova‡

\* *Peoples Friendship University of Russia, Moscow, Russia*

† *McGill University, Montreal, Canada*

‡ *University of Parma, Italy*

Large amplitude (geometrically non-linear) vibrations of doubly curved shallow shells with rectangular boundary, simply supported at the four edges and subjected to harmonic excitation normal to the surface in the spectral neighbourhood of the fundamental mode are subject of investigation in this paper. The first part of the study was presented by the authors in [M. Amabili et al. Nonlinear Vibrations of Doubly Curved Shallow Shells. Herald of Kazan Technological University, 2015, 18(6), 158–163, in Russian]. Two different non-linear strain-displacement relationships, from the Donnell's and Novozhilov's shell theories, are used to calculate the elastic strain energy. In-plane inertia and geometric imperfections are taken into account. The solution is obtained by Lagrangian approach. The non-linear equations of motion are studied by using (i) a code based on arclength continuation method that allows bifurcation analysis and (ii) direct time integration. Numerical results are compared to those available in the literature and convergence of the solution is shown. Interaction of modes having integer ratio between their natural frequencies, giving rise to internal resonances, is discussed. Shell stability under dynamic load is also investigated by using continuation method, bifurcation diagram from direct time integration and calculation of the Lyapunov exponents and Lyapunov dimension. Interesting phenomena such as (i) snap-through instability, (ii) subharmonic response, (iii) period doubling bifurcations and (iv) chaotic behavior have been observed.

**Key words and phrases:** nonlinear vibrations, shallow shells, equation, motion, stability

### 1. Introduction

In the present study [1], large-amplitude (geometrically non-linear) vibrations of doubly curved shallow shells with rectangular boundary, simply supported at the four edges and subjected to harmonic excitation normal to the surface in the spectral neighbourhood of the fundamental mode are investigated. Two different non-linear strain-displacement relationships, from the Donnell's and Novozhilov's shell theories, are used to calculate the elastic strain energy. In-plane inertia and geometric imperfections are taken into account. The solution is obtained by Lagrangian approach. The present theory is based on the studies developed by Amabili [2–4] for circular cylindrical shells, circular cylindrical panels and rectangular plates, respectively, properly adapted to take into account the different geometry. The non-linear equations of motion are studied by using (i) a code based on arclength continuation method that allows bifurcation analysis and (ii) direct time integration. The first part of the present study was published by the authors in [1]. Numerical results are compared to those available in the literature and convergence of the solution is shown. Interaction of modes having integer ratio between their natural frequencies, giving rise to internal resonances, is discussed. Shell stability under dynamic load is also investigated by using continuation method, bifurcation diagram from direct time integration and calculation of the Lyapunov exponents and Lyapunov dimension. Interesting phenomena such as (i) snap-through instability, (ii) subharmonic response, (iii) period doubling bifurcations and (iv) chaotic behavior have been observed; in this case up to four positive Lyapunov coefficients have been found, indicating hyperchaos.

## 2. Stability analysis

The Lagrange equations of motion for discrete models are as follows [1]:

$$\frac{dq_j}{dt} = \dot{q}_j, \quad \frac{dq}{dt} \left( \frac{\partial T_s}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} + \frac{\partial U_s}{\partial q_j} = Q_j, \quad j = 1, \dots, \quad (1)$$

where  $\frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} = 0$ ,  $U_s$  is the elastic strain energy, the generalized coordinates  $q_j$ ,  $j = 1, \dots$ , denote the displacements of an arbitrary point  $A_{m,n}$  of coordinates  $u_{m,n}$ ,  $v_{m,n}$ ,  $w_{m,n}$  in the positive directions outward the centre of the smallest radius of curvature. The very complicated term giving quadratic and cubic non-linearities can be written in the form:

$$\frac{\partial U_s}{\partial q_j} = \sum_{k=1}^{\text{dofs}} q_k \tilde{z}_{j,k} + \sum_{i,k=1}^{\text{dofs}} q_i q_k \tilde{z}_{j,i,k} + \sum_{i,k,l=1}^{\text{dofs}} q_i q_k q_l \tilde{z}_{j,i,k,l}, \quad (2)$$

where coefficients  $\tilde{z}$  have long expressions that include also geometric imperfections.

The presumable solution of the system (1) is  $q_j = q_j(t)$ ,  $\dot{q}_j = \dot{q}_j(t)$ , which corresponds to an undisturbed motion. After defining the excitations of the phase coordinates of the system as  $x_j = q_j - q_j(t)$ ,  $y_j = \dot{q}_j - \dot{q}_j(t)$ , the equations of the perturbed motions can be presented in the frame of the first approximation:

$$\begin{cases} \frac{dx_j}{dt} = y_j, \\ \frac{dy_j}{dt} = - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} a_{ji} x_i - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} b_{ji} y_i - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} c_{jn} x_n, \quad a_{ji} = z_{ji}, \quad b_{ji} = 2\zeta_j \omega_j, \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} c_{jn}(t) = & \sum_{i=1}^{\text{dofs}} z_{jin} q_i(t) + \sum_{k=1}^{\text{dofs}} z_{jnk} q_k(t) + \sum_{k=1}^{\text{dofs}} \sum_{l=1}^{\text{dofs}} z_{jnkl} q_k(t) q_l(t) + \\ & + \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{l=1}^{\text{dofs}} z_{jinl} q_i(t) q_l(t) + \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{k=1}^{\text{dofs}} z_{jikn} q_i(t) q_k(t). \end{aligned}$$

If the conditions

$$\begin{aligned} z_{jin} = 0, \quad z_{jnk} = 0, \quad z_{jnkl} = 0, \quad z_{jinl} = 0, \quad z_{jikn} = 0, \\ i = 1, \dots, \text{dofs}, \quad j = 1, \dots, \text{dofs}, \quad k = 1, \dots, \text{dofs} \end{aligned} \quad (4)$$

are satisfied the system of equations of the perturbed motions becomes a system of linear differential equations with constant coefficients

$$\begin{cases} \frac{dx_j}{dt} = y_j, \\ \frac{dy_j}{dt} = - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} a_{ji} x_i - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} b_{ji} y_i. \end{cases} \quad (5)$$

In this case the stability of the solution of the system (1) can be analyzed by means of the characteristic equation

$$\det(A - \lambda E) = 0 \quad (6)$$

of the system (5), where  $A = \begin{bmatrix} 0 & \delta_{ji} \\ -a_{ji} & -b_{ji} \end{bmatrix}$ .

Once all the roots of the characteristic equation (6) have negative real parts, then the trivial solution  $x_j = 0$ ,  $y_j = 0$  of the system (5) is asymptotically stable.

In this case there exists a Lyapunov's function of fixed sign  $V = V(x, y)$ , and its derivative, which can be obtained from the equations (3), is also a function of fixed sign of the opposite sign. This means that the solutions of the initial system  $q_j(t)$ ,  $\dot{q}_j = \dot{q}_j(t)$  for which the conditions (4) are valid, result as asymptotically stable.

The variable-coefficient system (3) can be written in the matrix formulation as follows:

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} = B(t)\tilde{x}, \quad \tilde{x} = (x_1, \dots, x_j, y_1, \dots, y_j), \quad (7)$$

$$D = \begin{bmatrix} 0 & D \\ -A - C(t) & -B \end{bmatrix}, \quad D = (\delta_{ji}), \quad A = (a_{ji}), \quad C(t) = (\delta_{jn}c_{jn}(t)), \quad B = (b_{ji}). \quad (8)$$

The Lyapunov's function can be written as a quadratic form with constant coefficients

$$2V = \tilde{x}^T M \tilde{x}, \quad (9)$$

where  $\tilde{x} = (x, y)$  and  $M = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}$ .

The derivative of  $V$  calculated from the equation (7) can be presented in the following form:

$$\dot{V} = W(x, y) - K(x, y, t), \quad (10)$$

$$W(x, y) = -x^T M_{12} A x - y^T M_{22} A x + x^T (M_{11} D - M_{12} B) y + y^T (M_{12} D - M_{22} B) y, \quad (11)$$

$$K(x, y, t) = (x^T M_{12} + y^T M_{22}) C(t) x. \quad (12)$$

From the expression (10) for  $\dot{V}$  the following conclusion can be drawn: if the quadratic form  $W(x, y)$  is a function of fixed negative sign, then the solutions  $q_j = q_j(t)$ ,  $\dot{q}_j = \dot{q}_j(t)$  of the system (1) for which  $K(x, y, t) \equiv 0$  are asymptotically stable.

### 3. Numerical solution

The equations of motion have been obtained by using the Mathematica 4 computer software [5] in order to perform analytical integrals of trigonometric functions. The generic Lagrange equation can be divided by the modal mass associated with  $\ddot{q}_j$  and then is transformed in the following two first-order equations by using the dummy variables  $y_j$  in a similar way as shown in the previous section

$$\begin{cases} \dot{q}_j = y_j, \\ \dot{y}_j = -2\zeta_j \omega_j y_j - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} z_{j,i} q_i - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{k=1}^{\text{dofs}} z_{j,i,k} q_i q_k - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{k=1}^{\text{dofs}} \sum_{l=1}^{\text{dofs}} q_i q_k q_l + f \cos(\omega t) \end{cases} \quad (13)$$

for  $j = 1, \dots, \text{dofs}$ , where

$$f = \begin{cases} 0, & \text{if } q_j = u_{m,n}, v_{m,n}, \text{ or } w_{m,n} \text{ with } m, n \text{ even,} \\ \tilde{f}/[\rho_s h a b / 4], & \text{if } q_j = w_{m,n} \text{ with } m, n \text{ odd,} \end{cases}$$

$\tilde{f}$  is the radial concentrated force, which define the external, normal, distributed load such that  $q_w = \tilde{f}\delta(u - \tilde{u}) \cos(\omega t)$ , applied to the shell,  $\tilde{u}, \tilde{v}$  give the position of the point of application of the force; the point excitation is located at  $\tilde{u} = a/2, \tilde{v} = b/2, \omega$  is the excitation frequency,  $t$  is the time,  $\delta$  is the Dirac delta function, and coefficients  $z$  are obtained by those in equation (2),  $z = \tilde{z}/[\rho_s h a b / 4]$ .

In equation (13) each generalized coordinate  $q_j$  (and therefore  $\varsigma - j$  and  $\omega_j$ ) has to be referred to mode  $(m, n)$ . A non-dimensionalization of variables is also performed for computational convenience: the time is divided by the period of the resonant mode and the vibration amplitudes are divided by the shell thickness  $h$ . The resulting  $2 \times$  dofs first-order non-linear differential equations are studied by using (i) the software AUTO 97 [6] for continuation and bifurcation analysis of non-linear ordinary differential equations, and (ii) direct integration of the equations of motion by using the DIVPAG routine of the Fortran library IMSL. Continuation methods allow following the solution path, with the advantage that unstable solutions can also be obtained; these are not ordinarily attainable by using direct numerical integration. The software AUTO 97 is capable of continuation of the solution, bifurcation analysis and branch switching by using arclength continuation and collocation methods. In particular, the shell response under harmonic excitation has been studied by using an analysis in two steps: (i) first the excitation frequency has been fixed far enough from resonance and the magnitude of the excitation has been used as bifurcation parameter; the solution has been started at zero force where the solution is the trivial undisturbed configuration of the shell and has been continued up to reach the desired force magnitude; (ii) when the desired magnitude of excitation has been reached, the solution has been continued by using the excitation frequency as bifurcation parameter.

Direct integration of the equations of motion by using Gear’s BDF method (routine DIVPAG of the Fortran library IMSL) has also been performed to check the results and obtain the time behaviour. Adams Gear algorithm has been used due to the relatively high dimension of the dynamical system. Indeed, when a high-dimensional phase space is analyzed, the problem can present stiff characteristics, due to the presence of different time scales in the response. In simulations with adaptive step size Runge-Kutta methods, spurious non-stationary and divergent motions can be obtained. Therefore, the Adams Gear method, designed for stiff equations, was used.

The bifurcation diagram of the Poincaré maps was also used in case of non-stationary response. It has been constructed by using the time integration scheme and by varying the force amplitude.

### 3.1. Maximum Lyapunov exponent

In order to evaluate the maximum Lyapunov exponent, which is useful to characterize regular or chaotic motion of the system, it is necessary to assume a reference trajectory  $x_r(t)$  in the phase plane ( $q, \dot{q}$  plane) and observe a neighbouring trajectory originated at infinitesimal initial perturbation  $\delta x(t_0)$  from the reference trajectory (see Argyris et al. [7]). The evolution of the perturbation during time,  $\delta x(t)$ , is governed by the following variational equations directly obtained from equations (13)

$$\frac{d}{dt} \delta q_j = \delta y_j,$$

$$\frac{d}{dt} \delta y_j = -2\varsigma_j \varpi_j \delta y_j - \sum_{i=1}^{\text{dofs}} z_{j,i} \delta q_i - \sum_{n=1}^{\text{dofs}} \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{k=1}^{\text{dofs}} z_{j,i,k} \delta q_n (\delta_{k,n} q_i + \delta_{i,n} q_k) -$$

$$- \sum_{n=1}^{\text{dofs}} \sum_{i=1}^{\text{dofs}} \sum_{k=1}^{\text{dofs}} \sum_{l=1}^{\text{dofs}} z_{j,i,k,l} \delta q_n (\delta_{i,n} q_k q_l + \delta_{k,n} q_i q_l + \delta_{l,n} q_k q_i), \text{ for } j = 1, \dots, \text{dofs}, \quad (14)$$

where  $\delta_{k,n}$  is the Kronecker delta. Assuming  $\delta q_j$  and  $\delta y_j$  as new variables, the simultaneous integration of the  $4 \times \text{dofs}$  first-order differential equations (equations (13) are non-linear and are integrated by using DIVPAG IMSL routine and equations (14) are linear, but with time-varying coefficients, and are integrated by using the adaptive step-size 4th-5th order Runge-Kutta method) has been performed. The excitation period has been divided in 10000 integration steps  $\Delta t$  in order to have accurate evaluation of the time-varying coefficients in equations (14) that are obtained at each step by integration of equations (13). To find a reference trajectory  $6 \times 10^6$  steps are waited in order to eliminate the transitory and  $1 \times 10^6$  steps are waited to eliminate the transitory on the variational equations (14). Then  $1 \times 10^6$  steps are used for evaluation of the maximum Lyapunov exponent  $\sigma_1$  for the reference trajectory  $x_r(t)$ , which is given by

$$\sigma_1 = \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{|\delta x(t)|}{|\delta x(t_0)|}. \quad (15)$$

Assuming the initial perturbation of unitary amplitude, equation (15) is simplified into

$$\sigma_1 = \limsup_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln |\delta x(t)|. \quad (16)$$

Then, by restoring at each integration time step  $k$  the amplitude of  $\delta x(t)$  to its original unitary measure by the following re-normalisation

$$\delta \bar{x}(t)_k = \frac{\delta x(t)_k}{d_k}, \quad (17)$$

where  $|\delta x(t)|_k = d_k$ , the following formula for the maximum Lyapunov exponent, evaluated at step  $k$ , is obtained

$$\sigma_{1,k} = \frac{1}{k \Delta t} \sum_{i=1}^k \ln d_i. \quad (18)$$

In the numerical calculation of the maximum Lyapunov exponent, the non-dimensional time previously introduced has been used.

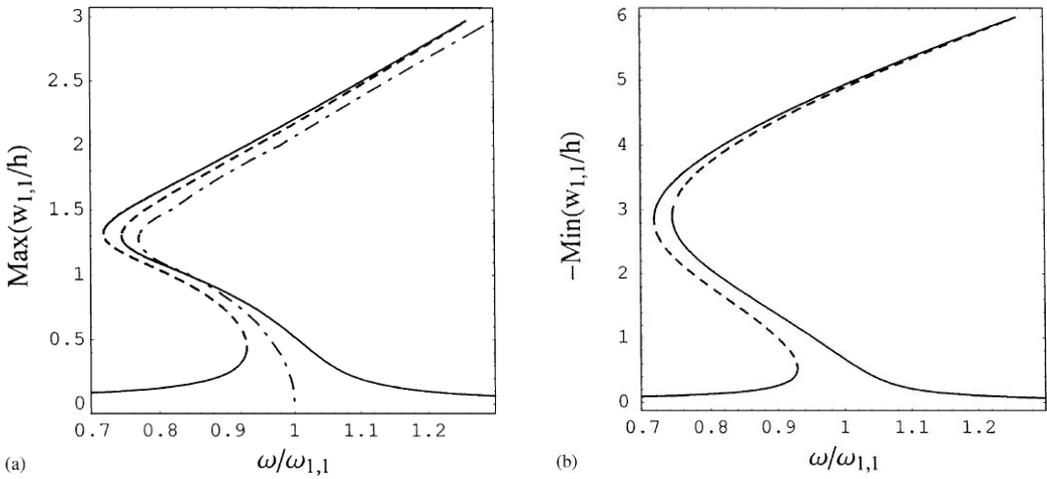
## 4. Results for harmonic excitation

Numerical calculations have been initially performed for doubly curved shallow shells, simply supported at the four edges, having the following dimensions and material properties: curvilinear dimensions  $a = b = 0.1m$ , radius of curvature  $R_x = 1m$ , thickness  $h = 0.001m$ , Young's modulus  $E = 206 \times 10^9$  Pa, mass density  $\rho = 7800$  kg/m<sup>3</sup> and Poisson ratio  $\nu = 0.3$ . Shallow shells with the same dimension ratios ( $R_x/a = 10$ ,  $h/a = 0.01$ ,  $a/b = 1$ ,  $\nu = 0.3$ ) were previously studied by Kobayashi and Leissa [8]. In all the numerical simulations a modal damping  $\varsigma_{1,1} = 0.004$  and harmonic force excitation at the center of the shell in  $z$  direction are assumed. If not explicitly specified, all calculations have been performed by using Donnell's shell theory.

### 4.1. Case of a spherical shell

A spherical shallow shell ( $R_y = 1m$ ) is considered. The frequency range around the fundamental frequency (mode ( $m = 1, n = 1$ )) in this case, where  $m$  and  $n$  are the numbers of half-waves in  $x$  and  $y$  direction, respectively) is investigated. The fundamental frequency  $\omega_{1,1}$  is 952.31 Hz according to Donnell’s shell theory and 952.26 Hz according to Novozhilov’s shell theory, i.e. practically the same results for both theories. Other natural frequencies useful in the present study are (according to Donnell’s theory):  $\omega_{1,3} = \omega_{3,1} = 2575.9$  Hz,  $\omega_{3,3} = 4472.3$  Hz. The amplitude of the harmonic force is  $\tilde{f} = 31.2$  N.

Figure 1 shows the maximum (in the time period; this is positive, i.e. outwards) and the minimum (negative, i.e. inwards) of the shell response in  $z$  direction in the spectral neighbourhood of the fundamental mode ( $m = 1, n = 1$ ) versus the excitation frequency.



**Figure 1. Amplitude of the response of the shell (generalized coordinate  $w_{1,1}$ ) versus the excitation frequency;  $R_x/R_y = 1$  (spherical shallow shell); fundamental mode ( $m = 1, n = 1$ ),  $\tilde{f} = 31.2$  N and  $\zeta_{1,1} = 0.004$ ; model with 9 dofs; Donnell’s theory: solid line — present stable results; dashed line — present unstable results; dot-dashed line — backbone curve from Kobayashi and Leissa [8]. (a) Maximum of the generalized coordinate  $w_{1,1}$  (in a vibration period); (b) minimum of the generalized coordinate  $w_{1,1}$**

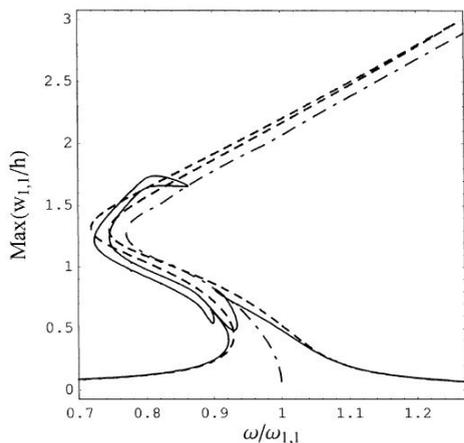
Calculations have been performed with the 9 dofs model. This model includes the following terms in the expressions for displacements  $u, v$  and  $w$ , which satisfy identically the geometric boundary conditions [1]:  $w_{1,1}, u_{1,1}, v_{1,1}, u_{3,1}, v_{3,1}, u_{1,3}, v_{1,3}, u_{3,3}, v_{3,3}$ .

Results are compared to those obtained by Kobayashi and Leissa [8], where only the backbone curve is given. The present results with 9 dofs are quite close to those in references [8] (considering that the backbone curve, indicating the maximum of the response for different force excitations, approximately passes through the middle of the forced response curve computed in the present calculation) and shows a softening type non-linearity, turning to hardening for vibration amplitudes about two times larger than the shell thickness. Comparing Figures 1,(a) and 1,(b) it is evident that displacement inwards is about two times larger than displacement outwards during a vibration period.

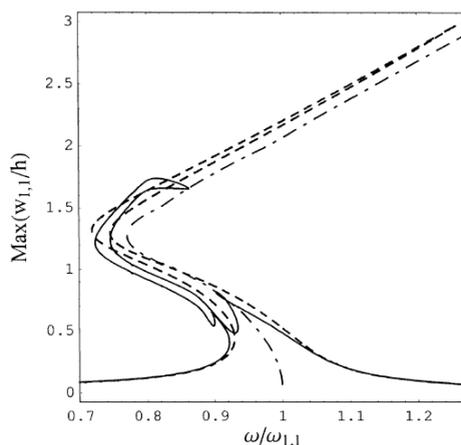
In order to check the convergence of the solution, the response has been calculated with a larger model, including 22 dofs. This model has the following additional generalized coordinates with respect to the 9 dofs model:  $w_{1,3}, w_{3,1}, w_{3,3}, u_{1,5}, u_{3,5}, u_{5,1}, u_{5,3}, u_{5,5}, v_{1,5}, v_{3,5}, v_{5,1}, v_{5,3}, v_{5,5}$ .

Comparison of the response computed with the 22 dofs and the 9 dofs models is given in Figure 3, where the backbone curve of Kobayashi and Leissa [8] is also shown.

The results of the 22 dofs model are moved slightly to the left with respect to the smaller 9 dofs model, and present a more complicate curve, especially in the frequency region around  $0.9\omega_{1,1}$ . In fact, for excitation frequency  $\omega = 0.9\omega_{1,1}$ , there is a 3:1 internal resonance with modes  $(m = 3, n = 1)$  and  $(m = 1, n = 3)$ , giving  $3\omega = \omega_{3,1} = \omega_{1,3}$ . A second relationship between natural frequencies that leads to internal resonances is for  $\omega = 0.77\omega_{1,1}$  where  $6\omega = \omega_{3,3}$ .



**Figure 2.** Amplitude of the response of the shell versus the excitation frequency;  $R_x/R_y = 1$  (spherical shell); fundamental mode ( $m = 1, n = 1$ ),  $\tilde{f} = 31.2$  N and  $\zeta_{1,1}\zeta_{1,1} = 0.004$ ; Donnell's theory: solid line — 22 dofs model; dashed line — 9 dofs model; dot-dashed line — backbone curve from Kobayashi and Leissa [8]



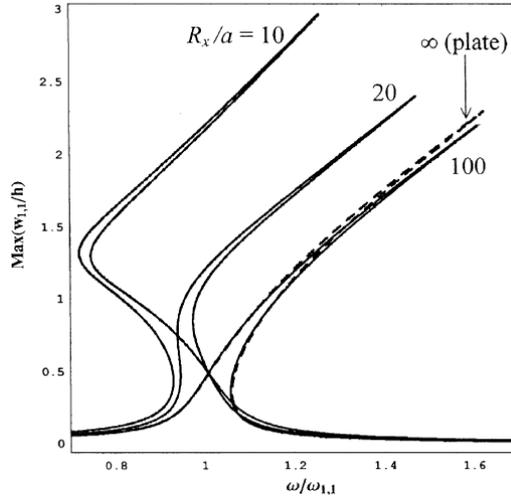
**Figure 3.** Effect of the curvature aspect ratio  $R_x/R_y$  on the shell response (maximum of the generalized coordinate  $w_{1,1}$ ) versus the excitation frequency; fundamental mode ( $m = 1, n = 1$ );  $\zeta_{1,1} = 0.004$ ; 9 dofs model; Donnell's theory

#### 4.2. Effect of different curvature

Figure 3 synthesizes all the maximum responses for the 9 dofs model for different shell curvature aspect ratios  $R_x/R_y$ . It is clearly shown that for  $R_x/R_y = 1$  (spherical), 0.5 and 0 (circular cylindrical) the shallow shell considered exhibits a softening type behaviour turning to hardening type for vibration amplitude of the order of magnitude of the shell thickness. The softening behaviour becomes weaker with the decrement of the curvature aspect ratio  $R_x/R_y$ . In particular, the softening behaviour of the spherical shallow shell for vibration amplitude around 1.3 times the shell thickness is very strong. On the other hand, for  $R_x/R_y = -0.5, -1$  (hyperbolic paraboloid) the shell has a strong hardening type behaviour without presence of the softening type region.

The effect of the curvature on the maximum response of spherical shallow shells is investigated in Figure 4, obtained with the 9 dofs model and Donnell's shell theory. Here the radius of curvature  $R_x = R_y$  is varied with respect to the value  $1m$  previously used, while all the other geometric and material characteristics are kept constant. In particular, three responses for  $R_x/a = 10, 20, 100$  are presented (solid line) and compared to the response of a flat square plate (dashed line) of the same dimension and material, also computed with the same theory [4] and the 9 dofs model. It must be observed that the

flat plate is the limiting case for a spherical shallow shell when  $R_x/a \rightarrow \infty$ . Figure 4 shows that increasing the curvature ratio  $R_x/a$  the shell response changes gradually from (i) strongly softening turning to hardening for vibration amplitude about two times the shell thickness, to (ii) fully hardening, which is the typical behaviour of flat plates. It is curious that a flat plate ( $R_x/a \rightarrow \infty$ ) presents a slightly weaker hardening type behaviour than the spherical shallow shell with  $R_x/a = 100$ . However, the difference is practically negligible.



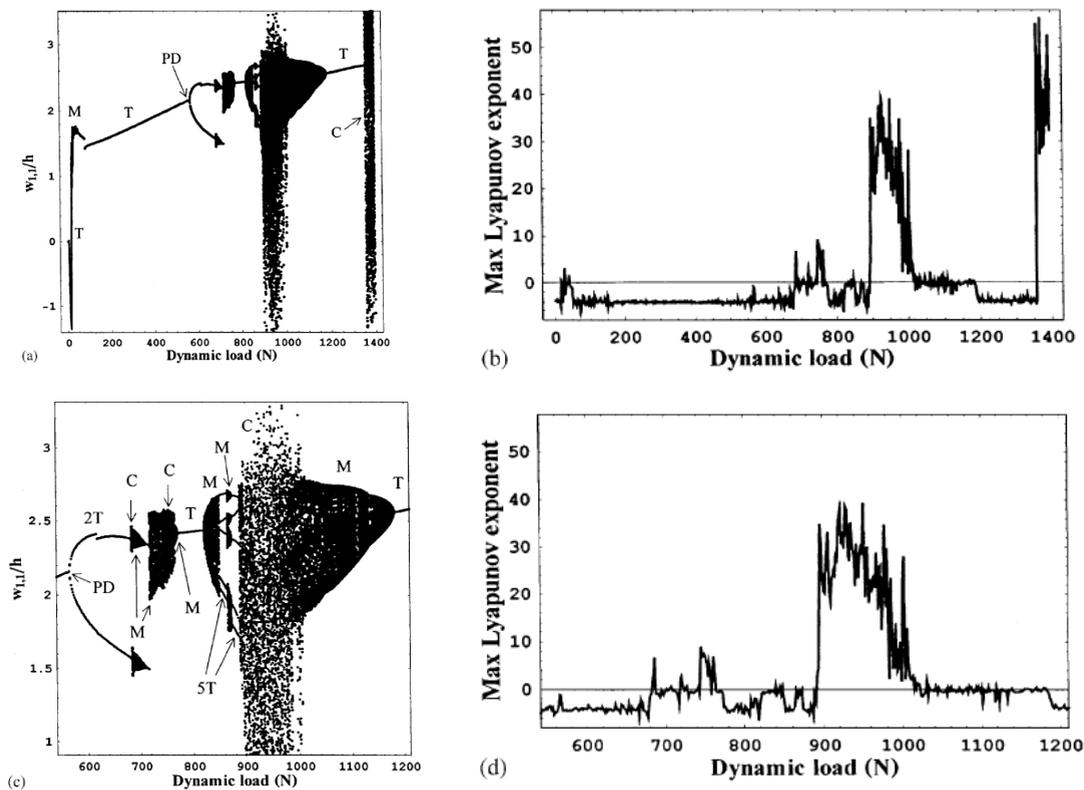
**Figure 4. Effect of the curvature ratio  $R_x/a$  on the response (maximum of the generalized coordinate  $w_{1,1}$ ) of spherical shallow shells versus the excitation frequency; fundamental mode ( $m = 1, n = 1$ );  $\zeta_{1,1} = 0.004$ ; 9 dofs model; Donnell’s theory. For  $R_x/a = 10$ ,  $w_{1,1} = 952.3$  Hz and  $\tilde{f} = 31.2$  N; for  $R_x/a = 20$ ,  $w_{1,1} = 637.1$  Hz and  $\tilde{f} = 11.16$  N; for  $R_x/a = 100$ ,  $w_{1,1} = 495.4$  Hz and  $\tilde{f} = 5.56$  N; for  $R_x/a = \infty$  (square plate),  $w_{1,1} = 488.6$  Hz and  $\tilde{f} = 5.4$  N**

### 5. Bifurcation analysis

The same shallow spherical shell studied in Section 4.1 is considered here and the 22 dofs model is used. Poincaré maps have been computed by direct integration of the equations of motion. The excitation frequency has been kept constant,  $\omega = 0.8\omega_{1,1}$ , and the excitation amplitude has been varied between 0 and 1400 N. The force range has been divided into 800 steps, so that the force is varied of 1.75 N at each step. 600 periods have been waited each time the force is changed of a step in order to eliminate the transient motion. The initial condition at the first step is zero displacement and velocity for all the variables; at the following steps the solution at the previous step, with addition of a small perturbation in order to find stable solution, is used as initial condition. The bifurcation diagrams obtained by all these Poincaré maps are shown in Figure 5, where the load is decreased from 1400 N to 0.

Simple periodic motion, period doubling bifurcation, subharmonic response, amplitude modulations and chaotic response have been detected, as indicated in Figures 5,(a), 5,(b). This indicates a very rich and complex nonlinear dynamics of the spherical shallow shell subject to large harmonic excitation. Different stable solutions coexist for the same set of system parameters, so that the solution is largely affected by initial conditions. In particular, Figures 5,(b) and 5,(d) give the maximum Lyapunov exponent  $\sigma$  associated

to the bifurcation diagram. It can be easily observed that (i) for periodic forced vibrations  $\sigma_1 < 0$ , (ii) for amplitude modulated response  $\sigma_1 = 0$ , and (iii) for chaotic response  $\sigma_1 > 0$ . Therefore  $\sigma$  can be conveniently used for identification of the system dynamics.



**Figure 5. Bifurcation diagram of Poincaré maps and maximum Lyapunov exponent for the spherical shallow shell under decreasing harmonic load with frequency  $\omega = 0.8\omega_{1,1}$ ;  $\zeta_{1,1} = 0.004$ ;**

**22 dofs model; Donnell's theory:**

**(a) Bifurcation diagram: generalized coordinate  $w_{1,1}$ ;  $T$  = response period equal to excitation period;  $PD$  = period doubling bifurcation;  $M$  = amplitude modulations;  $C$  = chaos;**

**(b) maximum Lyapunov exponent;**

**(c) bifurcation diagram: generalized coordinate  $w_{1,1}$ , enlarged scale;  $T$  = response period equal to excitation period;  $PD$  = period doubling bifurcation;  $2T$  = periodic response with two times the excitation period;  $5T$  = periodic response with five times the excitation period;  $M$  = amplitude modulations;  $C$  = chaos;**

**(d) maximum Lyapunov exponent, enlarged scale**

All the Lyapunov exponents have been evaluated for the case with excitation  $\tilde{f} = 1396$  N in Figure 5, corresponding to chaotic response. In this case, four positive Lyapunov exponents have been identified, allowing to classify this response as hyperchaos. The Lyapunov dimension in this case is  $d_L = 24.59$ .

## 6. Conclusions

The present study introduces a multi-mode expansion and uses accurate shell theories retaining in-plane inertia to study large-amplitude, forced vibrations of doubly curved shallow shells. This overcomes two frequent limitations in previous studies: (i) the use of mode expansions with one or two degrees of freedom; and (ii) the use of less accurate, but simpler, Donnell's shallow-shell theory, which neglects in-plane inertia. The occurrence of internal resonances in the problem studied is a clear indication that this important non-linear phenomenon has fundamental importance in the study of curved shells. Internal resonances can be studied only with multi-mode expansions, in some cases with a quite large number of degrees of freedom.

Bifurcation diagrams constructed by Poincaré maps and Lyapunov exponents show period doubling bifurcations and highly complex nonlinear behaviour of a spherical shallow shell under very large harmonic excitation. Up to four positive Lyapunov coefficients have been found for the studied case, indicating hyperchaos.

## References

1. M. Amabili, R. Garziera, R. Mukharlyamov, K. Riabova, Nonlinear Vibrations of Doubly Curved Shallow Shells, *Herald of Kazan Technological University* 18 (6) (2015) 158–163, in Russian.
2. M. Amabili, Comparison of Shell Theories for Large-Amplitude Vibrations of Circular Cylindrical Shells: Lagrangian Approach, *Journal of Sound and Vibration* (264) (2003) 1091–1125.
3. M. Amabili, Nonlinear Vibrations of Circular Cylindrical Panels, *Journal of Sound and Vibration* (281) (2005) 509–535.
4. M. Amabili, Nonlinear Vibrations of Rectangular Plates with Different Boundary Conditions: Theory and Experiments, *Computers and Structures* (82) (2004) 2587–2605.
5. S. Wolfram, *The Mathematica Book*, 4th edition, Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999.
6. E. J. Doedel, A. R. Champneys, T. F. Fairgrieve, Y. A. Kuznetsov, B. Sandstede, X. Wang, *AUTO 97: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations (with HomCont)*, Montreal, Canada: Concordia University, 1998.
7. J. Argyris, G. Faust, M. Haase, *An Exploration of Chaos*, Amsterdam: North-Holland, 1994.
8. Y. Kobayashi, A. W. Leissa, Large Amplitude Free Vibration of Thick Shallow Shells Supported by Shear Diaphragms, *International Journal of Non-Linear Mechanics* (30) (1995) 57–66.

УДК 534.1

### Устойчивость нелинейных колебаний пологих оболочек двойкой кривизны

Р. Г. Мухарлямов\*, М. Амабили†, Р. Гарзиера‡, К. Рябова‡

\* *Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

† *Университет МакГилл, Монреаль, Канада*

‡ *Университет Пармы, Парма, Италия*

В статье рассматриваются высокоамплитудные (геометрически нелинейные) колебания пологих оболочек двойкой кривизны с прямоугольными границами, свободно опертых по всем четырем краям и подвергающихся нормальному к поверхности гармоническому воздействию в спектральной окрестности основной формы. Первая часть проведенных исследований была представлена в работе [М. Амабили и др. Нелинейные колебания пологих

оболочек двойкой кривизны // Вестник КГТУ, 2015. — Т. 18, № 6. — С. 158–163] авторов. Для расчета энергии упругой деформации были использованы два различных нелинейных соотношения между деформацией и перемещением: из теории Доннелла и теории Новожилова. Учитывались также геометрические несовершенства формы оболочки и влияние инерции в плоскости. Построены приближенные уравнения динамики в форме уравнений Лагранжа второго рода. Предполагается, что потенциальная энергия сил упругости разлагается в ряд, в котором ограничиваются членами третьего порядка. Для исследования устойчивости невозмущенного движения используется метод функций Ляпунова и метод характеристических чисел. Полагая функцию Ляпунова квадратичной формой с постоянными коэффициентами, определяются условия, при которых решение, соответствующее невозмущенному движению системы при гармоническом воздействии, является устойчивым. Определяется оценка наибольшего характеристического числа Ляпунова. Приводятся результаты численных экспериментов, полученных для системы с гармоническим возбуждением. Рассматривается случай сферической оболочки, исследуется эффект влияния различной кривизны, проводится бифуркационный анализ.

**Ключевые слова:** нелинейные колебания, пологие оболочки, уравнение, движение, устойчивость

## Литература

1. Нелинейные колебания пологих оболочек двойкой кривизны / М. Амабили, Р. Гарзиера, Р. Мухарлямов, К. Рябова // Вестник КГТУ. — 2015. — Т. 18, № 6. — С. 158–163.
2. *Amabili M.* Comparison of Shell Theories for Large-Amplitude Vibrations of Circular Cylindrical Shells: Lagrangian Approach // *Journal of Sound and Vibration.* — 2003. — No 264. — Pp. 1091–1125.
3. *Amabili M.* Nonlinear Vibrations of Circular Cylindrical Panels // *Journal of Sound and Vibration.* — 2005. — No 281. — Pp. 509–535.
4. *Amabili M.* Nonlinear Vibrations of Rectangular Plates with Different Boundary Conditions: Theory and Experiments // *Computers and Structures.* — 2004. — No 82. — Pp. 2587–2605.
5. *Wolfram S.* *The Mathematica Book*, 4th edition. — Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1999.
6. AUTO 97: Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations (with HomCont) / E. J. Doedel, A. R. Champneys, T. F. Fairgrieve, Y. A. Kuznetsov, B. Sandstede, X. Wang. — Montreal, Canada: Concordia University, 1998.
7. *Argyris J., Faust G., Haase M.* *An Exploration of Chaos.* — Amsterdam: North-Holland, 1994.
8. *Kobayashi Y., Leissa A. W.* Large Amplitude Free Vibration of Thick Shallow Shells Supported by Shear Diaphragms // *International Journal of Non-Linear Mechanics.* — 1995. — No 30. — Pp. 57–66.

---

# Информатика и вычислительная техника

UDC 004.056.55

## Symmetric Encryption on the Base of Splitting Method

V. L. Stefanyuk<sup>\*†</sup>, A. H. Alhussain<sup>†</sup>

<sup>\*</sup> *Institute of Information Transmission Problems, Moscow, Russia*

<sup>†</sup> *Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia*

This article shows a method of secured transmitting of information by using splitting encryption algorithm which replaces each character in plaintext by k-integer in ciphertext. Splitting algorithm is a generalization of the secured transmission procedure with secret key that.

This study shows how to use a set of cryptographic keys which are generated using genetic algorithm and pseudorandom number generators, to solve some of serious problems in the modern cryptography.

**Key words and phrases:** genetic algorithm, pseudorandom number generator, encryption, decryption, cryptography, monomorphism, splitting algorithm

### 1. Introduction

The problems of information protection are excited the humanity for centuries. The need of information security has originated from the necessary of diplomatic negotiation, secret transferring of the military information, and protection of the personal information.

In the recent years, the information has become considered as financial category, this add more attraction and attention to the data security. Protection of the text during transmission via communication channels is an important task for business applications, and many other areas of the modern life [1].

There are several encryption algorithms; one of them is XOR encryption which uses pseudorandom number generator (PRNG). The experience has shown that XOR encryption has relative weakness against the actions of experienced hackers, and it is not entirely satisfy the requirements of high level of security [1, 2].

The principle of XOR encryption could be summarized as follows: generate keystream using pseudorandom numbers generators after that apply XOR operation (modulo-2 addition) between the obtained cryptographic keys and plaintext.

Modulo-2 addition in XOR encryption can be accomplished in several ways, for example, by the formula [1]:

$$y = x \oplus k, \tag{1}$$

where  $y$  – ciphertext,  $x$  – ASCII code plaintext,  $k$  – the generated cryptographic keys using PRNG; and  $\oplus$  — bitwise “exclusive or”. The schema of XOR cipher is shown in fig. 1.

This article is proposed a symmetric encryption algorithm, which improves the safety of traditional encryption algorithms by replacing each character in plaintext by k-chain in ciphertext. This mechanism would increase the level of security and it has not been studied previously in cryptography.

This paper is organized as follows: in section 1 we define the proposed encryption algorithm based on the splitting method, in section 2 provides a description of splitting algorithm, in section 3 proves the property of monomorphism of splitting method. In section 4 presents the results of experiments. The conclusion is contained in the final section.

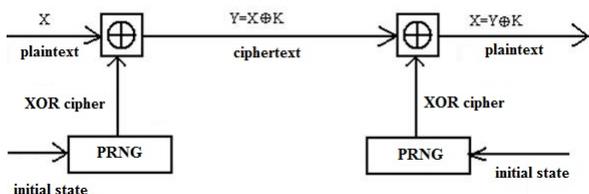


Figure 1. The scheme of XOR encryption

## 2. Defintion of the Encryption Algorithm Based on Sipliting Method

The term of splitting, which is referred in this paper, means replacing each character in plaintext by k-chain of integers in ciphertext; to be transmitted over a communication channel. Splitting provides defense in depth for the transmitted information from malicious actions of various kinds.

Definition: splitting k-level means representation of each character in plaintext as a sequence of k-integers in ciphertext.

The obtained ciphertext by this method is difficult to reveal, as the cryptographic keys are variable and the cipher changes randomly for each ciphered letter. This concept is new in cryptography, and there is no similar proposal has been issued or reported before.

In particular, the splitting algorithm provides reliable protection from cryptanalytic attacks based on counting the frequency of occurrence of the letters in the ciphertext. This algorithm does not depend on the probability distribution of the letters in the language or the other properties of the natural language. (If the primary requirement is the speed and size, it is possible to use  $k=1$ ; But if the degree and level of security and privacy is more important, choose  $k > 1$ ).

## 3. Description of Splitting Algorithm

### 3.1. Mathematical model of splitting algorithm

#### 3.1.1. Mathematical model of the encryption algorithm

$$\text{encryption process} = \begin{cases} \text{splitting level} = 1 \rightarrow \text{modification XOR encryption} \\ \text{splitting level } k, \text{ where } k > 1 \rightarrow \text{Encryption algorithm based} \\ \text{on sipliting method} \end{cases}$$

$$\text{encryption process } Y = \begin{cases} \text{KPRNG} \oplus \text{ASCII code, when } k = 1 \\ \text{quotient remainder}_k \dots \text{remainder}_2 \text{ remainder}_1, \\ \text{when } k > 1 \text{ quotient} = \frac{\text{KPRNG}}{\text{ASCII code}} \\ \text{remainder} = \text{KPRNG mod ASCII code} \\ \text{KPRNG} > 256 \end{cases}$$

KPRNG denotes a generator that creates a sequence of conventional pseudorandom number generator (PRNG) after applying the operations of genetic algorithm (GA), which ensures a high probability of inability to predict the next character.

### 3.1.2. Mathematical model of decryption algorithm

$$\text{Decryption process} = \begin{cases} k = 1 \rightarrow \text{KPRNG} \oplus \text{ASCII code} \\ k > 1 \rightarrow \frac{\text{KPRNG} - \text{remainder}}{\text{quotient}} \end{cases}$$

### 3.2. The scheme of splitting algorithm

#### 3.2.1. The scheme in case of $k = 1$

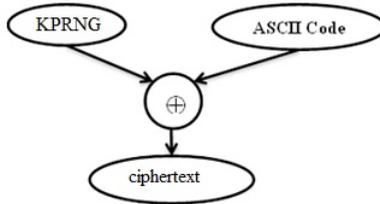


Figure 2. The scheme of splitting algorithm for  $k = 1$

#### 3.2.2. The scheme in case of $k > 1$

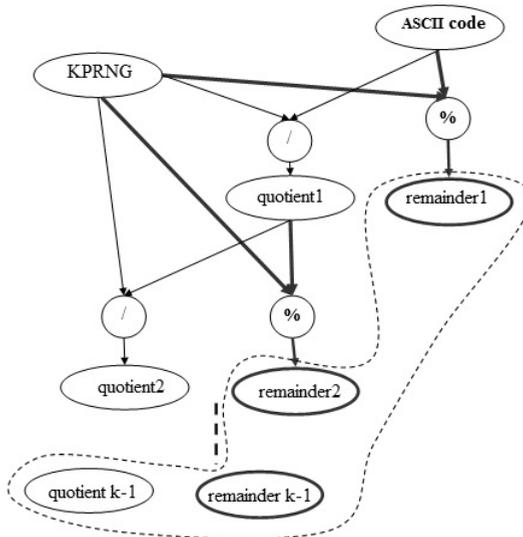
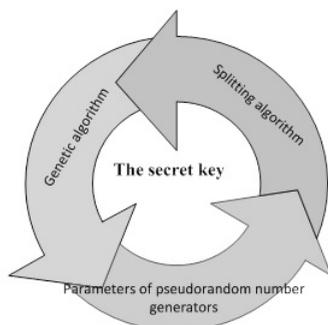


Figure 3. The scheme of splitting algorithm for  $k$  levels,  $k > 1$

### 3.3. The secret key

The key – it is a particular secret state of some parameters of the cryptographic algorithm of the data that provides only one choice of all the possible options for the transformation encryption algorithm [1]. In the symmetric algorithm the same piece of information (i.e. key) is used to encrypt and decrypt the message [1].

The secret key in the proposed encryption algorithm contains information about the genetic algorithm, the level of splitting, and parameters of pseudorandom number generator. The block diagram of the secret key is shown in fig. 4.



**Figure 4. The block diagram of the secret key**

The private key contains a set of parameters that make the cryptographic algorithm difficult for attacker to break it (increasing the level of security) [3]. These parameters are as follows:

1. The parameter of splitting algorithm, which indicates the “level of splitting”. This parameter specifies the number of characters of ciphertext, which is replaced by substituting in place of each character in cleartext to be sent over the channel.
2. The parameters of genetic algorithm, which include “generation size, the number of generations, the length of the chromosome, the initial value, the end value” [4].
3. The parameters of pseudorandom number generator, which belong to the selected pseudorandom number generator [4]:
  - (a) In the case of Blum-Blum-Shub and Fibonacci generators, parameters include “initial value and modulus”.
  - (b) In the case of a linear congruential generator, parameters include “initial value, modulus, increment and multiplier”.
  - (c) In the case of a quadratic congruential generator, parameters include “initial value, module, a, b, c”.

### 3.4. Steps of the encryption algorithm

Input: cleartext, the type of generator, and secret key.

In case if the splitting level is 1

1. Generate a sequence of cryptographic keys, denoted this sequence by the symbol ( $S_0$ ), on the basis of the selected pseudorandom number generator, secret key, and the selected genetic algorithm.
2. Convert each character in cleartext into its ASCII code value. Let denoted this number by the symbol ( $S_{ASCII}$ ).
3. Apply XOR operation between a part of the sequence ( $S_0$ ), which is obtained in step1, and the ASCII code representation ( $S_{ASCII}$ ), which is obtained in Step2, to obtain a new sequence, which we denote by the symbol  $C$ , where  $C = S_0 \oplus S_{ASCII}$ .
4. The sequence  $C$  is the ciphertext.

In the case of splitting level  $k$ , where  $k > 1$

1. Generate a sequence of cryptographic keys, denoted this sequence by the symbol ( $S_0$ ), on the basis of the selected pseudorandom number generator, secret key, and the selected genetic algorithm.
2. Convert each character in cleartext into its ASCII code value. Let denoted this number by the symbol ( $S_{ASCII}$ ).

3. Select keys which have a value more than 256 from the generated sequence  $S_0$ .
4. For each character in cleartext apply division  $k - 1$  time and save the remainder of integer division at each step, after that save the final result and quotient.
5. The ciphertext will be a sequence of the form:

$$\text{quotient}_{1k} \text{remainder}_{11} \text{remainder}_{12} \dots \text{remainder}_{1k}, \dots, \\ \text{quotient}_{nk} \text{remainder}_{n1} \text{remainder}_{n2} \dots \text{remainder}_{nk}.$$

## 4. The Main Theorem of Splitting Algorithm

### 4.1. Definition of the mathematical function of the splitting algorithm

Suppose we have a character  $\alpha_i$ , which is the ASCII code of the cleartext character, and let  $r_i$  – random number resulted from PRNG after applying GA. Suppose the function  $\Phi_k$  is the result of division  $\alpha_i$  by  $r_i$ , denote the quotient  $n_i$ , and the remainder of this division  $\delta_i$ . The function  $\Phi_k(\alpha_i)$  in our system is mapping a character  $\alpha_i$  by an ordered pair of integers  $n_i$  and  $\delta_i$ . The function  $\Phi_k$ , when the splitting level  $k = 2$ , is determined by the following relation:

$$\Phi_2(\alpha_i) = \left( \left[ \begin{matrix} r_i \\ \alpha_i \end{matrix} \right]; \delta_i \right).$$

**Theorem.** *The mapping function  $\Phi_2$  at  $r_i \geq 256$  reversible, and it is monomorphism.*

## 5. Experimental Results

### 5.1. A comparison between the traditional XOR encryption and the proposed one

#### 5.1.1. The traditional method of XOR algorithm

The following example shows the restriction of the security level in the traditional XOR encryption algorithm. If the private key is selected as shown in fig. 5, the generated cryptographic keys contain only one single value 1, 1, 1, ...

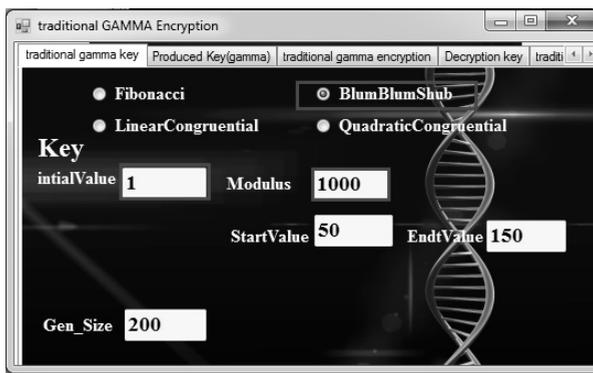


Figure 5. The secret key of the traditional XOR encryption algorithm

As shown in fig. 6. when encrypting the following cleartext, which consists of one character “aaaaa”.

As shown in fig. 7, the ciphertext will have the same value for each encrypted symbol = 96 96 96 96 96, as shown in fig. 7.

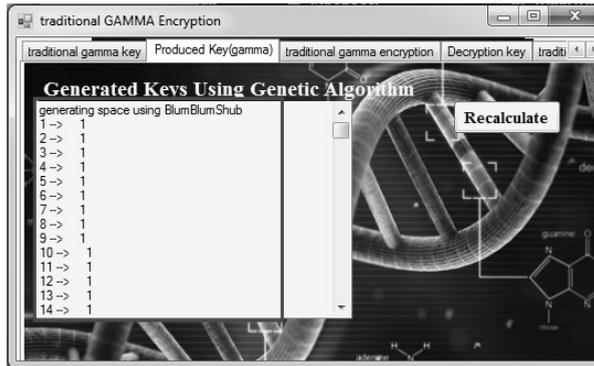


Figure 6. The set of cryptographic keys in the traditional XOR encryption

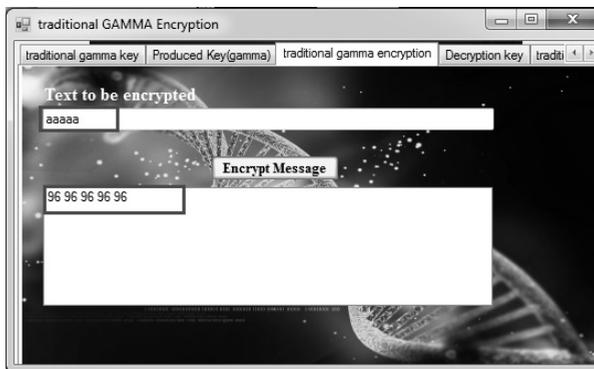


Figure 7. Cleartext and ciphertext (the traditional XOR encryption algorithm)

From this example, it is clear the limitation of the traditional XOR encryption algorithm, leading to relatively easily to analysis and break by attacker.

### 5.1.2. Modified algorithm of XOR encryption (splitting algorithm when $k = 1$ ).

The following example shows the improvement in the level of security, that the proposed splitting algorithm provides to the modified XOR encryption algorithm. The example is conducted by the usage of the same parameters as used in the example above. If the private key is selected as shown in fig. 8 (similar to the secret key in fig. 5), then the generated cryptographic keys contain many different values, as shown in fig. 9.

And when encrypting the cleartext, which consists of one symbol “aaaaa” as shown in fig. 10, the ciphertext will have several different values for each encrypted character, not one; In this case, the ciphertext will have the form “185 273 361 369 112” as shown in fig. 10. (Recall that in fig. 7, the ciphertext has the same value for all characters).

This example shows that the splitting algorithm that we proposed is highly resistant and provides a high level and degree of security as the key is variable and ciphertext vary randomly for each ciphered letters.

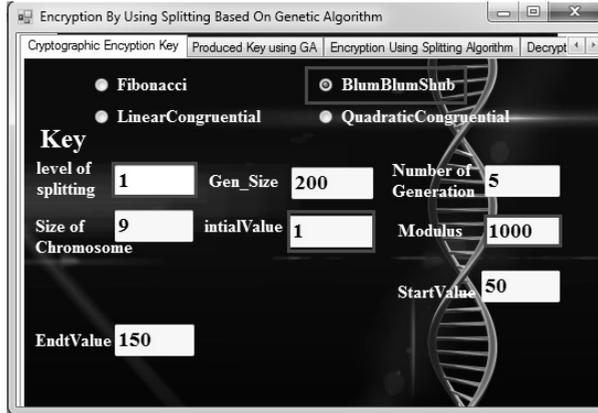


Figure 8. Secret key of the modified XOR encryption algorithm

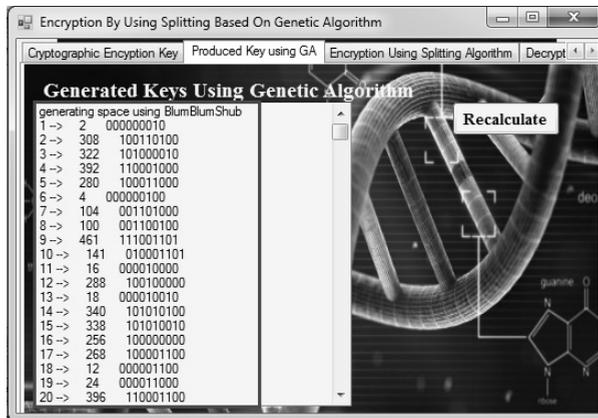


Figure 9. The set of cryptographic keys in the modified XOR encryption algorithm

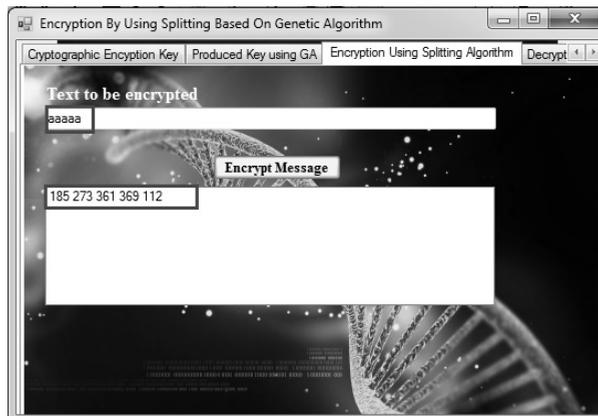


Figure 10. Cleartext and plaintext in the modified XOR encryption algorithm

### 5.2. Example of applying the encryption algorithm based on the splitting procedure when splitting level $k = 2$

For the experiment has been selected the plaintext:  $\ll \textit{Encryption} \gg$ . When select a linear congruential generator based on the secret key as shown in fig. 11, we get the ciphertext = 8 96 8 24 3 78 3 18 4 45 4 75 4 64 4 96 5 99 7 7 as shown in fig. 12.

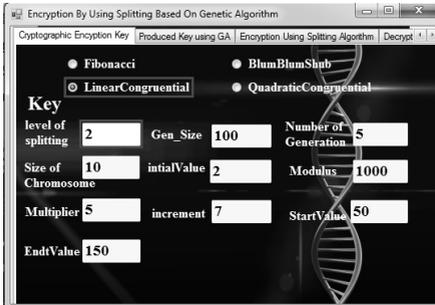


Figure 11. The secret key (splitting level = 2)



Figure 12. The cipher text in accordance with the secret key (splitting level = 2)

### 5.3. Example of applying the encryption algorithm based on the splitting procedure when splitting level $k = 3$

If the splitting level  $k = 3$  for the same secret key as shown in fig. 13 and the same plaintext as shown in fig. 14. We'll get the cipher

$text = 113\ 0\ 96\ 113\ 0\ 24\ 125\ 0\ 78\ 120\ 0\ 18\ 132\ 1\ 45\ 130\ 3\ 75\ 132\ 0\ 64\ 129\ 0\ 96\ 130\ 4\ 99\ 113\ 6\ 27,$  as shown in fig. 14.

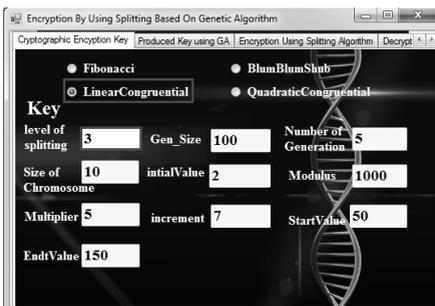


Figure 13. The secret key (splittinglevel = 3)



Figure 14. The ciphertext in accordance with the secret key (splittinglevel = 3)

## References

1. A. V. Sokolov, V. F. Shangin, Data protection in Distributed Enterprise Networks and Systems, DMK Press, Moscow, 2002, in Russian.

2. B. Y. Ryabko, A. N. Fionov, *The Foundations of Modern Cryptography for Specialists in Information Technologies*, Scientific World, Moscow, 2004, in Russian.
3. A. X. Alhussain, *Cryptosystem for Providing Secured Application based on Genetic Algorithm*, in: International Research Conference on Engineering, Science and Management 2014 (IRCESM 2014), International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering, June 2014, Dubai, United Arab Emirate, Vol. 14, Special Issue 5, 2014, pp. 8–14.
4. A. Alhussain, *Symmetric Encryption Algorithm Using a Genetic Algorithm and Pseudorandom Number Generators*, Natural and Technical Sciences (7(85), pages = 73–79, note = in Russian, language = english).

УДК 004.056.55

## Симметричное шифрование на основе метода расщепления

В. Л. Стефанюк<sup>\*†</sup>, А. Х. Алхуссаин<sup>†</sup>

<sup>\*</sup> *Институт проблем передачи информации РАН, Москва, Россия*

<sup>†</sup> *Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

Предлагаемое в статье расщепление касается защищенных способов передачи информации о каждом отдельном символе при их потоковой передаче. Расщепление является обобщением процедуры защищенной передачи с одиночным ключом.

Интеллектуальность расщепления состоит в обратимом кодировании (reversible coding) отдельных символов вместо использования теоремы отсчетов Котельникова-Шеннона для передачи по каналу связи последовательности блоков символов, с целью повышения степени защиты. Описан действующий вариант системы, предназначенный для передачи текстовых сообщений. В этой статье показано, как использовать набор криптографических ключей, которые генерируются с применением генетического алгоритма, и как выбрать генератор псевдослучайных чисел, чтобы решить некоторые современные криптографические задачи.

**Ключевые слова:** генетический алгоритм, генератор псевдослучайных чисел, шифрование, дешифрование, криптография, мономорфизм, алгоритм расщепления

## Литература

1. *Sokolov A. V., Shangin V. F. Data protection in Distributed Enterprise Networks and Systems*. — Moscow: DMK Press, 2002. — In Russian.
2. *Ryabko B. Y., Fionov A. N. The Foundations of Modern Cryptography for Specialists in Information Technologies*. — Moscow: Scientific World, 2004. — In Russian.
3. *Alhussain A. X. Cryptosystem for Providing Secured Application based on Genetic Algorithm // International Research Conference on Engineering, Science and Management 2014 (IRCESM 2014), International Journal of Emerging Technology and Advanced Engineering, June 2014, Dubai, United Arab Emirate*. — Vol. 14, Special Issue 5. — 2014. — Pp. 8–14.
4. *Alhussain A. Symmetric Encryption Algorithm Using a Genetic Algorithm and Pseudorandom Number Generators // Natural and Technical Sciences*. — 2015. — No 7(85), pages = 73–79, note = in Russian, language = english.

© Stefanyuk V. L., Alhussain A. H., 2016

---

# Физика

УДК 621.378.826.535.8

## Свойства плёнок диоксида титана с металлическими наночастицами

С. А. Алиев

*Российский университет дружбы народов, Москва, Россия*

В работе исследовались физико-химические свойства плёнок диоксида титана, содержащих наночастицы золота, изготовленных по гель-технологии. Проведено сравнение разных технологий синтеза диоксида титана. Экспериментально показано, что разработанная гель-технология позволяет получать практически 100% фазу наноструктурированного анатаза, что было подтверждено методами микроскопии высокого разрешения и результатами рентгеноструктурного анализа. Проведены исследования топографии и морфологии полученных образцов плёнок. Изучена фотоактивность синтезированных плёнок методом ЭПР-спектроскопии. Показано увеличение фотоактивности плёнок при УФ-облучении.

Проведена модификация диоксида титана наночастицами золота разной концентрации. Исследованы спектры пропускания в зависимости от соотношения компонент раствора при изготовлении гель-плёнок, а также от температуры отжига при их формировании. Показано, что спектры поглощения существенно зависят от параметров технологического режима. Исследование спектров поглощения плёнок диоксида титана с содержанием наночастиц золота показало существенные изменения спектров, а именно: возникали дополнительные пики поглощения разной интенсивности и наблюдался сдвиг края полосы пропускания. Эти изменения обусловлены, по-видимому, изменением структуры плёнок, а также агрегацией наночастиц золота. Проведённые исследования показали перспективность гель-метода для синтеза диоксида титана и его модифицирования наночастицами.

**Ключевые слова:** золь-гель и гель-методы, плёнки диоксида титана, модификация, наночастицы, золото, спектроскопия

### 1. Описание системы

Композитные диэлектрические плёнки с наночастицами металлов в последнее время привлекают внимание исследователей благодаря своим необычным свойствам, отличающимся от свойств объёмных материалов. Введение таких частиц в композитную плёнку приводит к появлению качественно новых физических свойств [1–3]. Вещество, находящееся в наноразмерной модификации, существенно отличается по многим характеристикам от объёмных материалов. Например, наночастицы золота проявляют ферромагнитные и каталитические свойства, особые оптические свойства, которые заключаются в возникновении полос поглощения в видимой области спектра, обусловленных резонансными явлениями на плазмонах. Интенсивность резонансного поглощения и его спектральное положение зависит от объёма включённой в диэлектрическую матрицу металлической частицы.

Такие диэлектрические матрицы с металлическими наночастицами могут быть использованы для повышения чувствительности спектральных методов анализа состава веществ, для создания различных сенсоров и новых метаматериалов, синтеза сверхрешёток, включая фотонные кристаллы и др. Особый интерес представляют оптические и нелинейно-оптические свойства таких структур. В качестве матрицы может быть использован диоксид титана, синтезированный различными методами.

Современные катализаторы на основе диоксида титана, получаемые в виде порошков, имеют ограниченное применение в химической технологии. Поэтому создание ФК-активных покрытий с высокоразвитой поверхностью на основе  $\text{TiO}_2$  является актуальной задачей, а разработка новых методов их получения с использованием

наноразмерных частиц  $\text{TiO}_2$ , а также способов модификации полученного материала с целью пространственного разделения зарядов в частицах и смещения спектра поглощения в область более низких энергий являются перспективным направлением создания высокоактивного фотокатализатора.

Нанокристаллический диоксид титана ( $\text{TiO}_2$ ) в настоящее время является одним из наиболее востребованных материалов, широко используемых в науке, промышленности и быту полупроводниковых материалов (см., например, [4–6]). Столь большой интерес к данному соединению обусловлен прежде всего его физико-химическими свойствами. Так, площадь удельной поверхности нанокристаллического  $\text{TiO}_2$  может достигать сотен квадратных метров на грамм вещества. Ширина запрещённой зоны варьируется в зависимости от способов синтеза в пределах 3,2–3,6 эВ. Энергетическое положение зоны проводимости  $\text{TiO}_2$  перекрывается с энергией возбуждённого состояния ряда красителей. Это позволило разработать на основе нанокристаллического  $\text{TiO}_2$  солнечные батареи нового инжекционного типа [7, 8], эффективность которых возрастает при увеличении площади удельной поверхности используемых наночастиц  $\text{TiO}_2$ . Кроме того, данное вещество является эффективным фотокатализатором для целого ряда химических реакций [9, 10] и широко используется в качестве фильтров для очистки воды и воздуха от токсичных органических примесей. В этом случае увеличение удельной поверхности за счёт наноструктурирования позволяет увеличить выход реакции фотоокисления на несколько порядков величины по сравнению с объёмной фазой вещества.

В настоящее время активно ведётся разработка новых технологий синтеза диоксида титана, позволяющих формировать образцы с широким распределением нанокристаллов по размерам [11, 12]. Указанные структуры характеризуются как большой площадью удельной поверхности, так и большим коэффициентом поглощения света, что позволяет повысить степень фотокаталитической активности данного материала.

Известно, что принцип действия  $\text{TiO}_2$  как фотокатализатора основан на формировании на его поверхности в процессе освещения ряда радикалов, являющихся сильными окислителями, например  $\cdot\text{O}_2^-$  и  $\cdot\text{OH}$  [11]. Вступая в реакцию окисления с различными органическими веществами, указанные радикалы способны разложить их до простейших составляющих —  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{CO}_2$  (см. рис. 1). Однако до настоящего времени отсутствуют данные о количественной связи между концентрацией спиновых центров и степенью фотокаталитической активности образцов  $\text{TiO}_2$ .

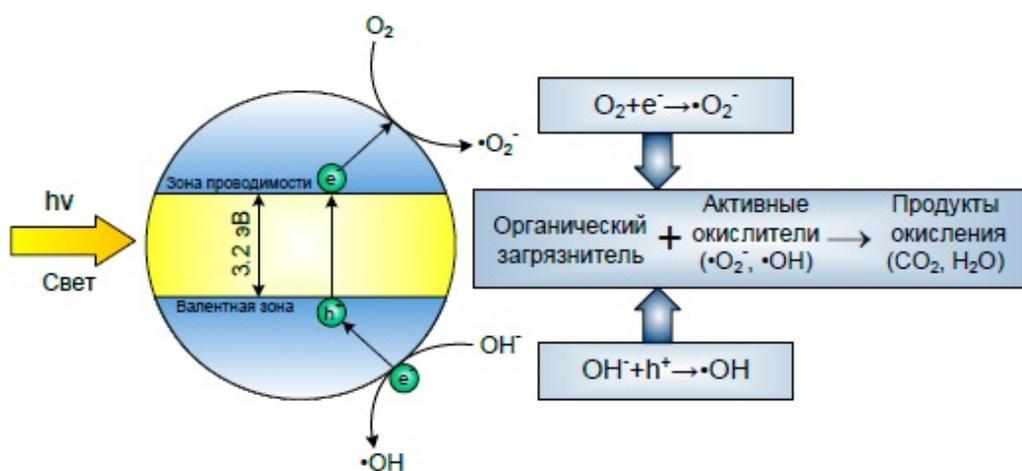


Рис. 1. Схема образования частиц  $\cdot\text{OH}$ ,  $\cdot\text{O}_2^-$  на поверхности  $\text{TiO}_2$  под действием света

## 2. Структура $\text{TiO}_2$

Свойства плёнок диоксида титана определяются методом синтеза и параметрами технологического режима.

При изготовлении плёнок по методике золь-гель образуется гидроксид титана  $\text{TiO}_2 \times \text{H}_2\text{O}$ , который в зависимости от условий его осаждения может содержать переменное число связанных с титаном ОН-групп.

При отжиге диоксида титана в аморфном состоянии сначала образуется анатаз (при этом частично удаляются ОН-группы), а затем — рутил. Аморфное состояние сохраняется дольше в щелочных средах, чем в кислых, так как в кислых средах уменьшение ОН происходит медленнее. Полное удаление воды происходит при температуре, большей  $600^\circ\text{C}$ . Относительное содержание структурных модификаций в зависимости от температуры отжига приведено в табл. 1.

Таблица 1  
Фазовое состояние  $\text{TiO}_2$  в зависимости от температуры отжига

$\text{TiO}_2$ , фазы	Температура отжига $400^\circ\text{C}$	Температура отжига $600^\circ\text{C}$	Температура отжига $800^\circ\text{C}$	Температура отжига $900^\circ\text{C}$
Анатаз	Аморфное состояние	84%	18%	0%
Рутил		16%	82%	100%

Аморфный  $\text{TiO}_2$  переходит в анатаз при температуре большей  $300^\circ\text{C}$ . Содержание анатаза в аморфной плёнке зависит от толщины плёнки. Плёнки толщиной 100–200 нм строго аморфны, а при толщине 500 нм содержат анатаз. Чем тоньше плёнка, тем меньше начальная степень кристаллизации.

Для получения тонких плёнок  $\text{TiO}_2$  и его модификаций используют золь-гель, мицеллярные и обращено мицеллярные, золь, гидро- и сольвотермальные, электрохимические и ряд других методов синтеза. Известно, что анатаз представляет наибольший интерес исследователей по сравнению с рутилом и брукитом. Однако на практике, как правило, получают смесь этих кристаллических модификаций. В лучших коммерческих образцах содержание рутила может достигать 20%.

Топография поверхности полученных плёнок была проведена при помощи сканирующего зондового микроскопа Интегра. Метод атомно-силовой микроскопии. Светлые упорядоченные полосы, согласно литературным источникам, могут быть отнесены к поликристаллическому диоксиду титана, а перемычки в виде светлых пятен между полосами — к кислородным вакансиям.

Однако на снимке (рис. 3) этой же плёнки в режиме 3D видно, что поверхность плёнки представляет собой рельеф, состоящий из хребтовидных выпуклостей и впадин между ними. Существование упорядоченных выпуклостей является причиной проявления гидрофобных свойств поверхности. Вода не смачивает такие поверхности, а существует в виде капель. При аналогичном исследовании образца с более низкой температурой отжига шероховатость образца была мала, что свидетельствует о преобладании аморфной фазы вещества.

Методом просвечивающей электронной микроскопии были получены снимки высокого разрешения. Плёнка представляет собой структуру в виде скопления кристаллитов диоксида титана. Характерные размеры кристаллитов лежат в диапазоне от 5 до 15 нм.

Контраст на полученном электронно-микроскопическом снимке позволяют судить о том, что кристаллиты собраны в структуру по типу «чешуи». Похожие результаты были получены методом атомно-силовой микроскопии.

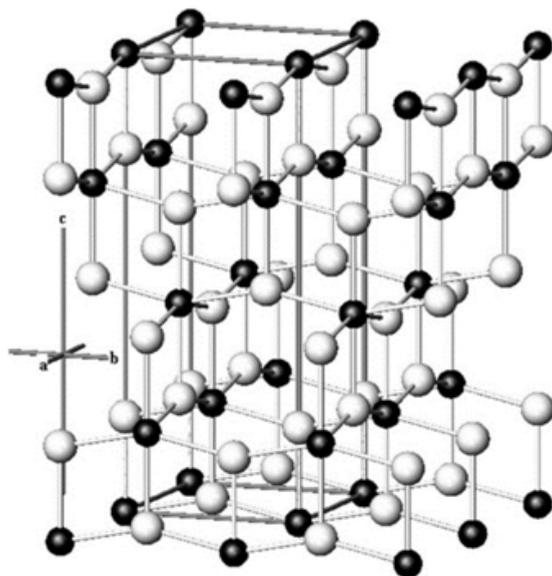
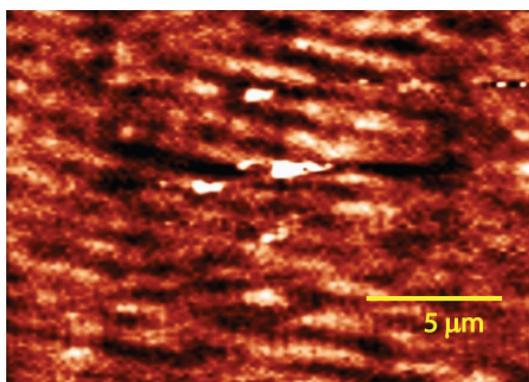
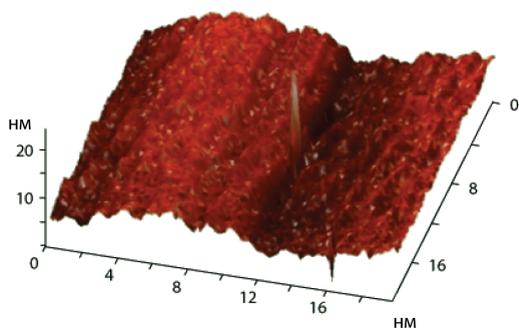


Рис. 2. Фрагмент кристаллической структуры анатаза. Атомы кислорода обозначены светлыми кружками, атомы титана — тёмными



(a)



(b)

Рис. 3. Топография участка плёнки, полученная методом АСМ (а), и её 3D модель (б)

### 2.1. Гель-технология

Диоксид титана может обладать большой площадью удельной поверхности за счёт наноструктурирования, что является одним из его важнейших физико-химических свойств. Увеличение площади удельной поверхности характерно для мелкокристаллической структуры  $\text{TiO}_2$  в форме анатаза. Это позволяет увеличить выход реакции фотоокисления на несколько порядков по сравнению с объёмным материалом.

В данной работе для получения плёнок  $\text{TiO}_2$  использовался метод, пока не имеющий общепризнанного названия, который позволяет получать анатаз в виде тонких

плёнок, содержание которого в объёме близко к 100%. Совместно с кафедрой общей химии мы условно назвали эту технологию «гель методом» получения тонких плёнок.

Гель технология это методика создания на стеклянных или кварцевых подложках оптически прозрачных плёнок, путём высушивания и последующего отжига нанесённого на эти подложки слоя специального раствора.

Получение по этой технологии оптически прозрачных и однородных плёнок не требует применения дорогостоящего, сложного оборудования, что и обусловило повышенный интерес к этой теме.

В отличие от процесса золь-гель здесь золеобразование не происходит, плёнки вытягиваются непосредственно из раствора, а не из суспензии, так же отсутствует прямая реакция гидролиза, то есть гидролиз происходит без добавления воды в раствор, вода конденсируется из атмосферы, плюс ОН группы для гидролиза отщепляются при удалении спирта из раствора.

### раствор → гель → оксид

В качестве базового материала для получения плёнок диоксида кремния и стёкол используют тетрабутоксид титана  $\text{Ti}(\text{OCH}_2\text{C}_3\text{H}_7)_4$ , который смешивают в соответствующих пропорциях с триэтиленгликолем  $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{O}_4$  и домешивают бутанол  $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$  до определённой отметки.

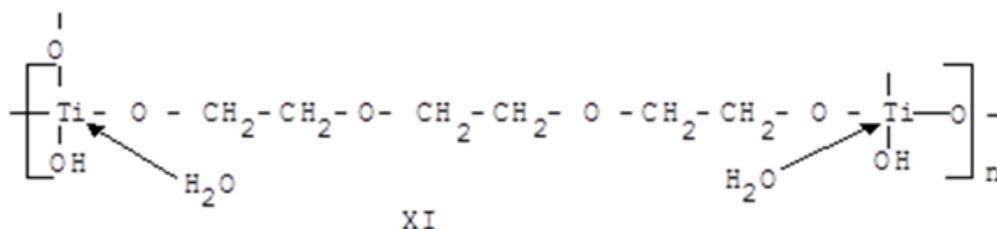


Рис. 4. Элемент-структурный каркас гель раствора

Полученный гель раствор наносится на подложку. Подложки с нанесённым диоксидом титана сушатся при температуре  $\sim 100^\circ\text{C}$  в течение 10–20 мин. Вследствие испарения растворителя на подложке остаётся пористая плёнка — каркас. Последующий отжиг при температуре  $\sim 300\text{--}800^\circ\text{C}$  приводит к образованию сплошной плёнки, пористость которой не превышает 10–15%.

Основным преимуществом метода гель является возможность получения плёнок с заданными свойствами. Гель технология обеспечивает возможность очень точного управления структурой получаемого вещества на молекулярном уровне и получение многокомпонентных оксидных соединений с точным соблюдением стехиометрического соотношения элементов, высокой гомогенностью и сравнительно низкой температурой образования оксидов ( $\sim 400\text{--}800^\circ\text{C}$ ), что значительно расширяет спектр веществ (особенно органических), используемых в качестве компонентов раствора. Внесение определённых добавок может обеспечить, например, нелинейные свойства получаемых плёнок, что даёт возможность удвоения частоты, модуляции сигнала и т. п.

## 2.2. Модифицирование диоксида титана

В настоящее время легирование структуры диоксида титана другими элементами является наиболее перспективным подходом для модифицирования  $\text{TiO}_2$ . Легирование позволяет расширить спектр поглощения  $\text{TiO}_2$ , а также повысить его ФК активность [13].

### 2.3. Модифицирование катионами

Суть катионного модифицирования заключается во введении катионов металлов в кристаллическую структуру диоксида титана на позиции ионов  $Ti_4^+$ . В качестве катионов могут быть использованы наночастицы редкоземельных, благородных и переходных металлов [14, 15]. Легирование катионами значительно расширяет спектр поглощения  $TiO_2$ , увеличивает окислительно-восстановительные свойства, образующихся радикалов и повышает квантовую эффективность за счёт снижения степени рекомбинации электронов и дырок. Природа и концентрация легирующей примеси изменяет распределение заряда на поверхности  $TiO_2$ , влияет на процесс фотокоррозии и ФК активность [16].

Увеличение поглощения видимого света не всегда приводит к увеличению активности фотокатализатора. В результате легирования катионами, в структуре  $TiO_2$  появляется определённое количество дефектов, которые могут выступать в качестве центров рекомбинации зарядов. Однако этого можно избежать, если после легирования проводить дополнительный отжиг фотокатализатора в кислородсодержащей атмосфере [15].

Образцы  $TiO_2$ , легированные наночастицами металлов, по сравнению с чистым  $TiO_2$  отличаются более высоким значением электропроводности. В работе [17] исследователи добились увеличения ФК активности  $TiO_2$  за счёт легирования гадолинием (Gd). Образцы  $Gd_3^+/TiO_2$ , приготовленные по золь-гель методу имеют низкую ширину запрещённой зоны, маленький размер частиц, высокую внешнюю площадь поверхности и высокий объём пор.

Недостатками легирования в позиции  $Ti_4^+$  в основном является повышенная степень рекомбинации зарядов, что приводит к снижению ФК активности даже под действием УФ-света. Современные исследования подтверждают вывод о том, что для снижения ширины запрещённой зоны  $TiO_2$  лучше использовать анионные примеси, а не катионные [18–20].

### 2.4. Модифицирование анионами

За последние несколько лет (2007–2013 гг.) было показано, что образцы  $TiO_2$ , легированные неметаллическими элементами (углерод, сера, фтор, азот и т.д.), в анионные позиции кислорода, демонстрируют высокую ФК активность в видимой и УФ-области солнечного спектра. Среди всех анионов, наибольший интерес вызвали углерод и азот [21].

Замещение атомов кислорода на углерод приводит к образованию новых уровней выше потолка валентной зоны  $TiO_2$ , что снижает ширину запрещённой зоны и смещает спектр поглощения [22]. Включение углерода в  $TiO_2$  также может привести к образованию углеродистых соединений на поверхности фотокатализатора, которые выступают в виде центров поглощения видимого излучения.

Легирование атомами азота является самым популярным способом улучшить ФК показатели  $TiO_2$  [19, 23, 24]. Введение азота в структуру  $TiO_2$  способствует значительному сдвигу спектра поглощения в видимую область солнечного спектра, изменению показателя преломления, увеличению твёрдости, увеличению электропроводности, увеличению модуля упругости и увеличению ФК активности по отношению к видимому свету. Атомы азота могут встраиваться в структуру  $TiO_2$  либо на позиции кислорода, либо в междоузлье кристаллической решётки. При замещении кислорода образуется новый уровень над потолком валентной зоны  $TiO_2$ , а при встраивании в междоузлье решётки уровень образуется на 0,76 эВ выше валентной зоны [25]. Как показано на рисунке 5, присутствие азота сужает ширину запрещённой зоны  $TiO_2$  до 2,5 эВ, что способствует поглощению фотонов с меньшей энергией [26].

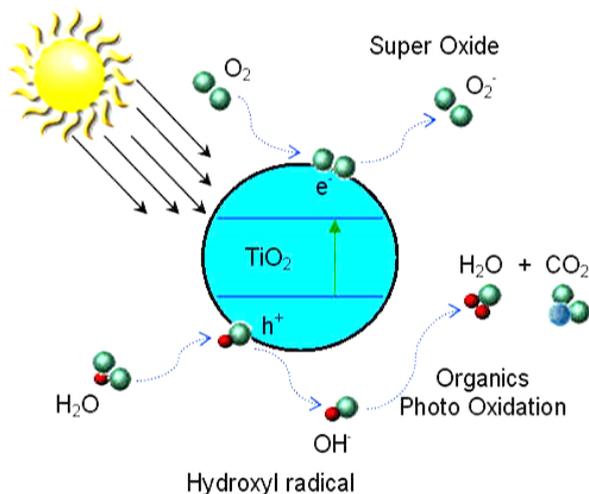


Рис. 5. Схема изменения зонной структуры  $\text{TiO}_2$  при легировании атомами азота

## 2.5. Нанесение наночастиц металлов

Нанесение металлических частиц является другим альтернативным подходом к модификации фотокатализаторов. В литературе имеются данные, свидетельствующие о том, что благородные металлы, включая Pt, Ag, Au, Pd, Ni, Cu и Rh, значительно увеличивают фотокаталитическую активность  $\text{TiO}_2$  [27]. Поскольку уровни Ферми у этих металлов ниже, чем у  $\text{TiO}_2$ , то фотовозбуждённые электроны могут перейти из зоны проводимости  $\text{TiO}_2$  на металлические частицы, осаждённые на поверхности  $\text{TiO}_2$ , в то время как фотогенерированные дырки остаются в валентной зоне  $\text{TiO}_2$ . Это значительно снижает возможность рекомбинации электронов и дырок, в результате чего происходит эффективное разделение и повышается фотокаталитическая активность. Многочисленные данные в литературе свидетельствуют о том, что свойства этих фотокатализаторов зависят от дисперсности частиц металла. Когда размер частиц металла составляет менее 2,0 нм, композиты проявляют высокую каталитическую активность [28]. Было высказано предположение, что слишком высокая концентрация частиц металла блокирует поверхность  $\text{TiO}_2$  и снижает степень поглощения фотонов, также сами частицы металла выступают в виде электронно-дырочных центров рекомбинации, что приводит к снижению эффективности фотокатализатора. В работе [29] предложен синтез наночастиц  $\text{TiO}_2$ , допированных частицами (1 мас. %) благородных металлов ( $\text{Me}/\text{TiO}_2$ ,  $\text{Me} = \text{Ag}$ ,  $\text{Au}$  и  $\text{Pt}$ ), золь-гель методом.  $\text{Me}/\text{TiO}_2$ -катализаторы показали высокую ФК активность, даже при облучении видимым светом. Наибольшую ФК активность проявил катализатор, модифицированный золотом. При использовании других благородных металлов ФК активность уменьшалась.

## 3. Экспериментальные исследования

В настоящей работе проведено исследование спектральных характеристик плёнок диоксида титана с наночастицами золота. Исследования проводились на плёнках, сформированных с помощью нового гель метода при разных параметрах технологического режима, а именно, состава исходных растворов и температуры отжига. Кроме того, варьировалась и концентрация золота в образцах (см. таблицу 2).

Таблица 2

## Экспериментальные образцы

Температура отжига	ТЭГ:ТБТ				
	1:2	1:1	2:1	1:1 (Au:TiO <sub>2</sub> =1:100)	1:1 (Au:TiO <sub>2</sub> =1:50)
450°C	K1	K3	K2	KZ1	KZ2
700°C	K4	K6	K5	KZ3	KZ4

Исследование спектров пропускания полученных образцов было проведено с помощью спектрофотометра SPECORD.

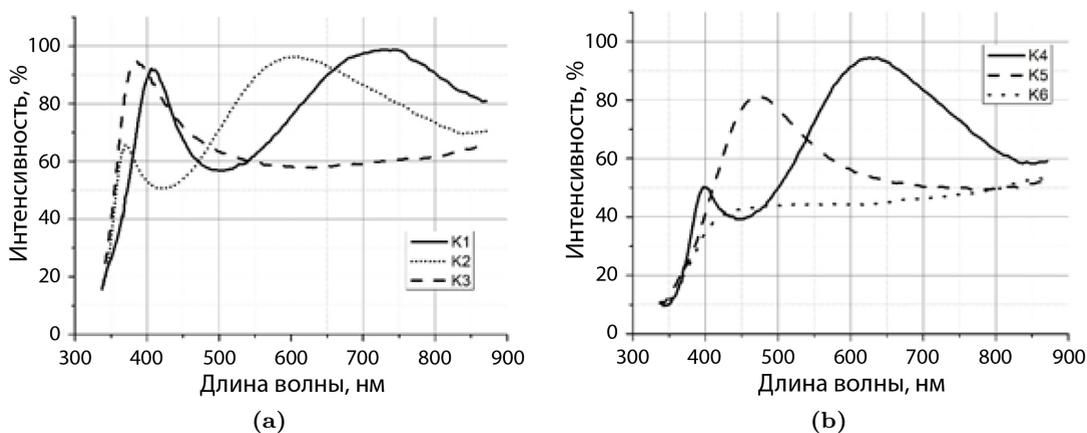


Рис. 6. Спектры пропускания образцов без золота при температуре отжига 450°C (а) и 700°C (б)

Анализ спектров пропускания образцов без добавления золота (K1, K2, K3) при температуре отжига 450°C показал, что край полосы поглощения соответствовал  $\lambda = 330$  нм. Для образца K1 максимум поглощения наблюдался при  $\lambda = 500$  нм с амплитудой  $\sim 40\%$  и шириной  $\sim 150$  нм. Для образца K2 пик поглощения (50%) сдвигался на 50 нм в коротковолновую область до  $\lambda = 450$  нм с шириной 80 нм. На длине волны 600 нм пропускание составляло 97% и на  $\lambda = 850$  нм возникал второй пик поглощения с шириной  $\sim 200$  нм и амплитудой  $\sim 30\%$ . Длинноволновый пик был аналогичен пику K1. Образец K3 обладал примерно одинаковым поглощением  $\sim 40\%$  в диапазоне длин волн от 500 до 870 нм. При увеличении температуры отжига (700°C) край полосы поглощения сдвигался до 350 нм для всех образцов. У образца K4 максимум поглощения соответствовал  $\lambda = 450$  нм (амплитуда 60%, ширина 80 нм). Для образца K5 наблюдался медленный рост интенсивности поглощения в диапазоне от 470 до 870 нм и максимум поглощения составил 50%. Образец K6 обладал примерно одинаковым поглощением в диапазоне от 450 нм и выше.

Анализ полученных результатов позволяет сделать выводы об изменении спектров пропускания при введении в плёнки наночастиц золота. Изменялась интенсивность полос поглощения и их спектральное положение. Наглядное представление об изменении спектров даёт рисунок 7b, который представляет собой разностный спектр, полученный вычитанием спектров образцов без золота и с золотом.

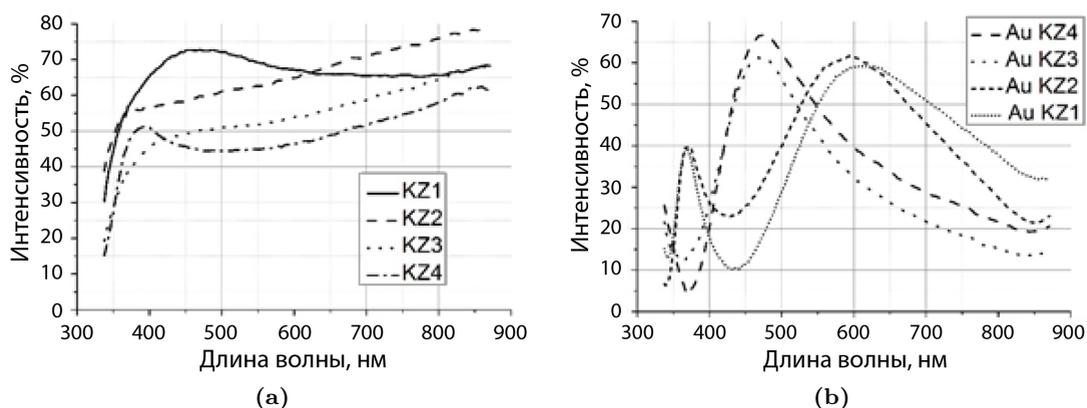


Рис. 7. Спектр пропускания образцов с золотом (а) и разностные спектры поглощения Au в плёнках (б)

При введении золота происходит увеличение поглощения во всём спектральном диапазоне. Как видно из рисунка 7б при температуре отжига  $450^{\circ}\text{C}$  наблюдался характерный пик на длине волны 600 нм. Увеличение температуры отжига изменяет спектральное положение пика, сдвигая его в коротковолновую область на 130 нм. Сдвиг пика и изменение его ширины по-видимому, связано с образованием агломератов, изменением размера и формы частиц.

Полученные образцы исследовались методами электронного парамагнитного резонанса (ЭПР), комбинационного рассеяния (КР) и оптической спектрофотометрии. ЭПР спектры были получены на установке SENS ESR 70-03 XD/2. Как видно из рис. 8, УФ-облучение привело к изменению в спектре ЭПР, а именно — амплитуда сигнала существенно возросла.

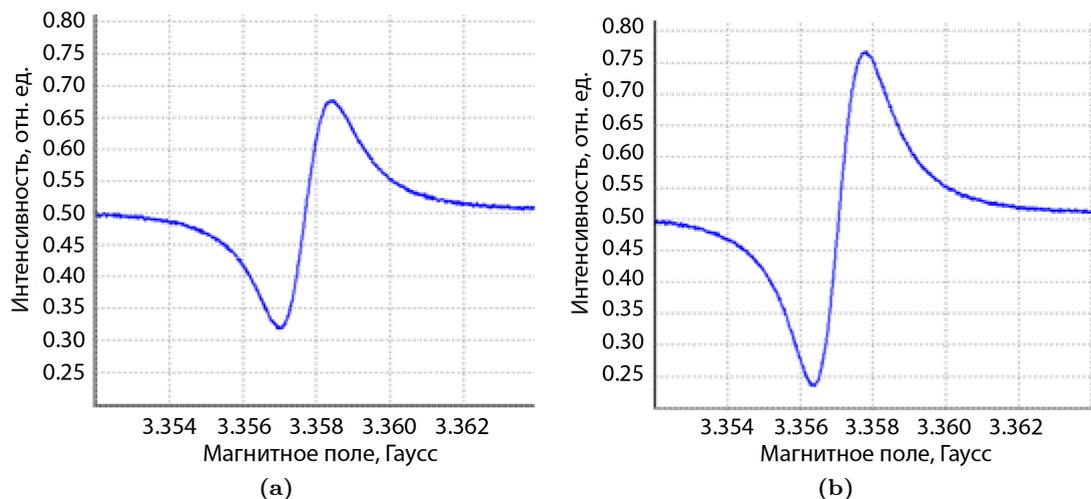


Рис. 8. Спектры ЭПР плёнки диоксида титана до и после воздействия УФ-облучения

Спектры комбинационного рассеяния были получены на установке NTegra Spectra. На КР-спектре образца, отожжённого при температуре  $450^{\circ}\text{C}$ , наблюдались 4 пика, положение которых соответствуют анатазу [30], а при температуре  $700^{\circ}\text{C}$  появляются пики, характерные для рутила. Установлено, что с повышением доли ТЭГ в исходном растворе, а также при введении золота в раствор, температура фазового перехода анатаз-рутил возрастает.

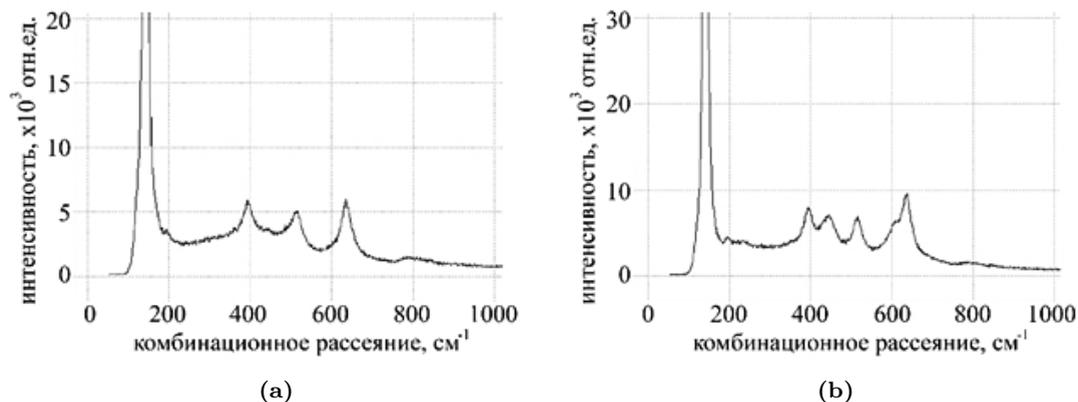


Рис. 9. Спектры комбинационного рассеяния плёнок при температуре отжига  $450^{\circ}\text{C}$  (а) и  $700^{\circ}\text{C}$  (б)

#### 4. Заключение

По разработанной технологии, названной гель технологией, были изготовлены образцы плёнок  $\text{TiO}_2$  в форме анатаза, массовая доля которого близка к 100%, что было подтверждено методами микроскопии высокого разрешения и результатами рентгеноструктурного анализа. Проведено исследование физико-химических свойств плёнок диоксида титана. Представленные результаты исследования топографии и морфологии полученных образцов плёнок также подтвердили существование анатазной фазы материала плёнок.

Изучение фотоактивности синтезированных плёнок методом ЭПР спектроскопии показало увеличение фотоактивности плёнок при УФ облучении, источником которого служила ртутная лампа. Выявлено, что плёнки диоксида титана в форме анатаза проявляют большую фотоактивность, чем рутильная и смешанные модификации, в то время как на поверхности диоксида титана в аморфной фазе не генерируется свободных радикалов в процессе облучения и фоточувствительность в УФ-диапазоне не проявляется.

Проведена модификация диоксида титана наночастицами золота разной концентрации. Исследование спектров пропускания показало их зависимость от соотношения компонент раствора при изготовлении гель плёнок, а также от температуры отжига при их формировании.

Спектры комбинационного рассеяния показали, что для образца, отожжённого при температуре  $450^{\circ}\text{C}$ , наблюдались 4 пика, положение которых соответствуют анатазу [30], а при температуре  $700^{\circ}\text{C}$  появляются пики, характерные для рутила. Отсюда можно сделать вывод, что с повышением доли ТЭГ в исходном растворе, а также при введении золота в раствор, температура фазового перехода анатаз-рутил возрастает.

Кроме того, спектры поглощения существенно зависели от параметров технологического режима. Исследование спектров поглощения плёнок диоксида титана

с содержанием наночастиц золота показало существенные изменения спектров, а именно, возникали дополнительные пики поглощения разной интенсивности и наблюдался сдвиг края полосы поглощения. Эти особенности спектров обусловлены, по-видимому, изменением структуры плёнок, а именно изменением размера и формы частиц, при изменении параметров технологического режима. Существенную роль при этом играет агрегация наночастиц золота, т. е. возникновение агломератов, в результате чего произошло увеличение поглощения во всём спектральном диапазоне.

Представляет интерес исследование спектров поглощения плёнок диоксида титана, модифицированных другими элементами, такими как кобальт и углерод.

## Литература

1. *Kreibig U., Vollmer M.* Optical Properties of Metal Clusters. — Berlin: Springer-Verlag, 1995.
2. *Карпов С. В., Слабко В. В.* Оптические и фотофизические свойства фрактально-структурированных золей металлов. — Новосибирск: Издательство СО РАН, 2003.
3. Critical Coupling at Oblique Incidence / S. Deb, S. D. Gupta, J. Banerji, S. Dutta Gupta // *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics.* — 2007. — Vol. 9. — Pp. 555–559.
4. Photoelectrochemistry, Photocatalysis and Photoreactors / Ed. by M. Schiavello. — Dordrecht: Reidel Publ. Co., 1985.
5. Фотокаталитическое преобразование солнечной энергии / под ред. К. И. Замаева. — Новосибирск: Наука, 1985. — Т. Т. 1,2.
6. *Ollis D. F., Al-Ekabi H.* Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air. — Amsterdam: Elsevier, 1993.
7. *Grätzel M. J., Howe R. F.* // *Nature.* — 1991. — Vol. 91. — P. 3906.
8. Influence of Oxygen and Water Related Surface Defects on the Dye Sensitized TiO<sub>2</sub> Solar Cell / J. Weidmann, T. Dettrich, E. Konstantinova, I. Laueremann, I. Uhlenndorf, F. Koch // *Solar Energy Materials and Solar Cells.* — 1999. — Vol. 56. — P. 153.
9. *Fujishima A., Hashimoto K., Watanabe T.* TiO<sub>2</sub> Photocatalysis. Fundamentals and Applications. — Tokyo: BKC Inc., 1999.
10. Environmental Applications of Semiconductor Photocatalysis / M. R. Hoffmann, S. T. Martin, W. Choi, D. W. Bahnemann // *Chem. Rev.* — 1995. — Vol. 95, No 1. — Pp. 69–96.
11. *Chen X., Mao S. S.* Titanium Dioxide Nanomaterials: Synthesis, Properties, Modifications, and Applications // *Chem. Rev.* — 2007. — Vol. 107, No 7. — Pp. 2891–2959.
12. Sol–Gel Processed Functional Nanosized TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub>-Based Films for Photocatalysts and Other Applications / N. Smirnova, A. Eremenko, V. Gayvoronskij, I. Petrik, Y. Gnatyuk, G. Krylova, A. Korchev, A. Chujko // *Journal of Sol-Gel Science and Technology.* — 2004. — Vol. 32, No 1-3. — Pp. 357–362.
13. *Морозов А. Н.* Синтез и каталитические свойства наноструктурированных покрытий диоксида титана.: Кандидатская диссертация. — М., 2014. — С. 23, дисс... канд. хим. наук. дисс... канд. хим. наук.
14. *Teh C. M., Mohamed A. R.* Role of Titanium Dioxide and Ion Doped Titanium Dioxide on Photocatalytic Degradation of Organic Pollutants (Phenol Compounds and Dyes) in Aqueous Solutions: A Review // *Journal of Alloys and Compounds.* — 2011. — Vol. 509. — Pp. 1648–1660.
15. *Yalcin Y., Kilic M., Cina Z.* Fe<sub>3</sub><sup>+</sup>-doped TiO<sub>2</sub>: A Combined Experimental and Computational Approach to the Evaluation of Visible Light Activity // *Applied Catalysis.* — 2010. — Vol. 99. — Pp. 469–477.

16. *Carp O., Huisman C. L., Reller A.* Photoinduced Reactivity of Titanium Dioxide // *Progress in Solid State Chemistry*. — 2004. — Vol. 32. — Pp. 33–177.
17. *El-Bahy Z. M., Ismail A. A., Mohamed R. M.* Enhancement of Titania by Doping Rare Earth for Photodegradation of Organic Dye (Direct Blue) // *Journal of Hazardous Materials*. — 2009. — Vol. 166. — Pp. 138–143.
18. *Choi W., Termin A., Hoffmann M. R.* The Role of Metal Ion Dopants in Quantum-Sized TiO<sub>2</sub>: Correlation Between Photoreactivity and Charge Carrier Recombination Dynamics // *Journal of Physical Chemistry*. — 1994. — Vol. 98. — Pp. 13669–13679.
19. Visible Light Photocatalysis in Nitrogen-Doped Titanium Oxides / R. Asahi, T. Morikawa, T. Ohwaki, K. Aoki, Y. Taga // *Science*. — 2001. — Vol. 293. — Pp. 269–271.
20. Effects of F Doping on the Photocatalytic Activity and Microstructures of Nanocrystalline TiO<sub>2</sub> Powders / J. C. Yu, J. Yu, W. Ho, Z. Jiang, L. Zhang // *Chemistry of Materials*. — 2002. — Vol. 14. — Pp. 3808–3816.
21. Carbon and Nitrogen Co-Doped TiO<sub>2</sub> with Enhanced Visible Light Photocatalytic Activity / D. Chen, Z. Jiang, J. Geng, Q. Wang, D. Yang // *Industrial and Engineering Chemistry Research*. — 2007. — Vol. 46. — Pp. 2741–2746.
22. Carbon-Doped Anatase TiO<sub>2</sub> Obtained from TiC for Photocatalysis under Visible Light Irradiation / M. Shen, Z. Wu, H. Huang, Y. Du, Z. Zou, P. Yang // *Materials Letters*. — 2007. — Vol. 60. — Pp. 693–697.
23. *Asahi R., Morikawa T.* Nitrogen Complex Species and Its Chemical Nature in TiO<sub>2</sub> for Visible Light Sensitized Photocatalysis // *Chemical Physics*. — 2007. — Vol. 339. — Pp. 57–63.
24. *Колесник И. В.* Мезопористые материалы на основе диоксида титана: Кандидатская диссертация. — М., 2010. — С. 155, дисс... канд. хим. наук. дисс... канд. хим. наук.
25. Preparation of Nitrogen-Doped Titanium Dioxide with Visible-Light Photocatalytic Activity Using a Facile Hydrothermal Method / F. Peng, L. Cai, L. Huang, H. Yu, H. Wang // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. — 2008. — Vol. 69. — Pp. 1657–1664.
26. A Simple Method to Prepare N Doped Titania Hollow Spheres with High Photocatalytic Activity under Visible Light / Y. Ao, J. Xu, D. Fu, C. Yuan // *Journal of Hazardous Materials*. — 2009. — Vol. 167. — Pp. 413–417.
27. *Rupa A. V., Divakar D., Sivakumar T.* Titania and Noble Metals Deposited Titania Catalysts in the Photodegradation of Tartrazine // *Catalysis Letters*. — 2009. — Vol. 132. — Pp. 259–267.
28. Selective Oxidation with Dioxygen by Gold Nanoparticle Catalysts Derived from 55-atom Clusters / M. Turner, V. B. Golovko, O. P. H. Vaughan, P. Abdulkin, A. Berenguer-Murcia, M. S. Tikhov, B. F. G. Johnson, R. M. Lambert // *Nature*. — 2008. — Vol. 454. — Pp. 981–983.
29. Enhancement of Photocatalytic Activity by Metal Deposition: Characterization and Photonic Efficiency of Pt, Au and Pd Deposited on TiO<sub>2</sub> Catalyst / S. Sakthivel, M. V. Shankar, M. Palanichamy, B. Arabindoo, D. W. Bahnemann, V. Murugesan // *Water Research*. — 2004. — Vol. 38, No 13. — Pp. 3001–3008.
30. *Шульга Ю. М., Кабачков Е. Н. и др.* Термостимулированные превращения в брукитсодержащих нанопорошках TiO<sub>2</sub>, полученных гидролизом TiCl<sub>4</sub> // *Журнал технической физики*. — 2011. — Т. 81, № 1. — С. 101–105.

UDC 621.378.826.535.8

## Properties of Titanium Dioxide Films with Metallic Nanoparticles

S. A. Aliev

*Peoples' Friendship University of Russia, Moscow, Russia*

The physicochemical properties of titanium dioxide thin films prepared by the gel technology, doped with gold nanoparticles, were investigated. The differences between technologies for the synthesis of titanium dioxide were compared. It is experimentally shown that the developed gel technology allows to get almost 100% phase of nanostructured anatase that was confirmed by high-resolution microscopy and X-ray results. The topography and morphology of the films samples were investigated. The photoactivity of the synthesized films was studied by EPR spectroscopy. It is shown that the photoactivity of the films is increased by the UV irradiation.

Titanium dioxide was modified by nanoparticles of gold with various concentrations. Has been investigated the depending of the ratio of the solution components in the manufacture of gel films, as well as of the annealing temperature of their formation on transmission spectra. It is shown that the absorption spectra depend significantly on the parameters of the technology. A study of the absorption spectra of titanium dioxide films containing gold nanoparticles showed significant changes in the spectra, exactly, there is an additional absorption peaks of varying intensity and the observed shift in the passband region. These changes are caused, presumably, by changes of the film structure, and the aggregation of gold nanoparticles. Studies have shown the prospects of the gel method for the synthesis of titanium dioxide and its modification of nanoparticles.

**Key words and phrases:** sol-gel and gel methods, dioxide titanium film, modification, nanoparticles, gold, spectroscopy

## References

1. U. Kreibig, M. Vollmer, *Optical Properties of Metal Clusters*, Springer-Verlag, Berlin, 1995.
2. S. V. Karpov, V. V. Slabko, *Optical and Photophysical Properties of Fractal-Structured Metal Sols*, SB RAS Publishing House, Novosibirsk, 2003.
3. S. Deb, S. D. Gupta, J. Banerji, S. Dutta Gupta, Critical coupling at oblique incidence, *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics* 9 (2007) 555–559.
4. M. Schiavello (Ed.), *Photoelectrochemistry, Photocatalysis and Photoreactors*, Reidel Publ. Co., Dordrecht, 1985.
5. K. I. Zamaraev, *Photocatalytic Conversion of Solar Energy*, Vol. 1,2, Nauka, Novosibirsk, 1985.
6. D. F. Ollis, H. Al-Ekabi, *Photocatalytic Purification and Treatment of Water and Air*, Elsevier, Amsterdam, 1993.
7. M. J. Grätzel, R. F. Howe, *Nature* 91 (1991) 3906.
8. J. Weidmann, T. Dettrich, E. Konstantinova, I. Lauermann, I. Uhlendorf, F. Koch, Influence of oxygen and water related surface defects on the dye sensitized  $\text{TiO}_2$  solar cell, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 56 (1999) 153.
9. A. Fujishima, K. Hashimoto, T. Watanabe, *TiO<sub>2</sub> Photocatalysis. Fundamentals and Applications*, BKC Inc., Tokyo, 1999.
10. M. R. Hoffmann, S. T. Martin, W. Choi, D. W. Bahnemann, Environmental applications of semiconductor photocatalysis, *Chem. Rev.* 95 (1) (1995) 69–96.
11. X. Chen, S. S. Mao, Titanium dioxide nanomaterials: Synthesis, properties, modifications, and applications, *Chem. Rev.* 107 (7) (2007) 2891–2959.
12. N. Smirnova, A. Eremenko, V. Gayvoronskij, I. Petrik, Y. Gnatyuk, G. Krylova, A. Korchev, A. Chujko, Sol-gel processed functional nanosized  $\text{TiO}_2$  and  $\text{SiO}_2$ -based films for photocatalysts and other applications, *Journal of Sol-Gel Science and Technology* 32 (1-3) (2004) 357–362.

13. A. N. Morozov, Synthesis and catalytic properties of the nanostructured titania coatings, Ph.D. thesis, Moscow, PhD Thesis (2014).
14. C. M. Teh, A. R. Mohamed, Role of titanium dioxide and ion doped titanium dioxide on photocatalytic degradation of organic pollutants (phenol compounds and dyes) in aqueous solutions: A review, *Journal of Alloys and Compounds* 509 (2011) 1648–1660.
15. Y. Yalcin, M. Kilic, Z. Cina,  $\text{Fe}_3^+$ -doped  $\text{TiO}_2$ : A combined experimental and computational approach to the evaluation of visible light activity, *Applied Catalysis* 99 (2010) 469–477.
16. O. Carp, C. L. Huisman, A. Reller, Photoinduced reactivity of titanium dioxide, *Progress in Solid State Chemistry* 32 (2004) 33–177.
17. Z. M. El-Bahy, A. A. Ismail, R. M. Mohamed, Enhancement of titania by doping rare earth for photodegradation of organic dye (direct blue), *Journal of Hazardous Materials* 166 (2009) 138–143.
18. W. Choi, A. Termin, M. R. Hoffmann, The role of metal ion dopants in quantum-sized  $\text{TiO}_2$ : Correlation between photoreactivity and charge carrier recombination dynamics, *Journal of Physical Chemistry* 98 (1994) 13669–13679.
19. R. Asahi, T. Morikawa, T. Ohwaki, K. Aoki, Y. Taga, Visible light photocatalysis in nitrogen-doped titanium oxides, *Science* 293 (2001) 269–271.
20. J. C. Yu, J. Yu, W. Ho, Z. Jiang, L. Zhang, Effects of f doping on the photocatalytic activity and microstructures of nanocrystalline  $\text{TiO}_2$  powders, *Chemistry of Materials* 14 (2002) 3808–3816.
21. D. Chen, Z. Jiang, J. Geng, Q. Wang, D. Yang, Carbon and nitrogen co-doped  $\text{TiO}_2$  with enhanced visible light photocatalytic activity, *Industrial and Engineering Chemistry Research* 46 (2007) 2741–2746.
22. M. Shen, Z. Wu, H. Huang, Y. Du, Z. Zou, P. Yang, Carbon-doped anatase  $\text{TiO}_2$  obtained from tic for photocatalysis under visible light irradiation, *Materials Letters* 60 (2007) 693–697.
23. R. Asahi, T. Morikawa, Nitrogen complex species and its chemical nature in  $\text{TiO}_2$  for visible light sensitized photocatalysis, *Chemical Physics* 339 (2007) 57–63.
24. I. V. Kolesnik, Mesoporous materials based on titanium dioxide, Ph.D. thesis, Moscow, PhD Thesis (2010).
25. F. Peng, L. Cai, L. Huang, H. Yu, H. Wang, Preparation of nitrogen-doped titanium dioxide with visible-light photocatalytic activity using a facile hydrothermal method, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 69 (2008) 1657–1664.
26. Y. Ao, J. Xu, D. Fu, C. Yuan, A simple method to prepare n doped titania hollow spheres with high photocatalytic activity under visible light, *Journal of Hazardous Materials* 167 (2009) 413–417.
27. A. V. Rupa, D. Divakar, T. Sivakumar, Titania and noble metals deposited titania catalysts in the photodegradation of tartrazine, *Catalysis Letters* 132 (2009) 259–267.
28. M. Turner, V. B. Golovko, O. P. H. Vaughan, P. Abdulkin, A. Berenguer-Murcia, M. S. Tikhov, B. F. G. Johnson, R. M. Lambert, Selective oxidation with dioxygen by gold nanoparticle catalysts derived from 55-atom clusters, *Nature* 454 (2008) 981–983.
29. S. Sakthivel, M. V. Shankar, M. Palanichamy, B. Arabindoo, D. W. Bahnemann, V. Murugesan, Enhancement of photocatalytic activity by metal deposition: Characterization and photonic efficiency of pt, au and pd deposited on  $\text{TiO}_2$  catalyst, *Water Research* 38 (13) (2004) 3001–3008.
30. Y. M. Shul'ga, E. N. Kabachkov, D. V. Matyushenko, E. N. Kurkin, I. A. Domashnev, Thermally stimulated transformations in brookite-containing  $\text{TiO}_2$  nanopowders produced by the hydrolysis of  $\text{TiCl}_4$ , *Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics* 56 (1) (2011) 97–101.

# Remarks to the Standard Theory of $K^0$ , $\bar{K}^0$ Meson Oscillations. $S$ -Strangeness and $CP$ -Violation in Weak Interactions in System of $K^0$ , $\bar{K}^0$ Mesons

Kh. M. Beshtoev

*Institute of Applied Mathematics and Automation of KBSC of RAS  
Nalchik, Kabardino-Balkarskaya Republic, Russia*

Usually it is supposed that  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations are realized through  $K_S$ ,  $K_L$  meson states. It is necessary to remark that  $K_S$ ,  $K_L$  meson states are produced at  $CP$  violation in the weak interactions, besides these states are nonorthogonal states. Since  $K_S$ ,  $K_L$  meson states are nonorthogonal states they cannot generate  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations. For this aim can be used only orthogonal states. In reality at strangeness —  $S$  violation  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are transformed into superpositions of orthogonal  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  meson states. Then through these  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  meson states there are realized oscillations of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons. Further  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  states at  $CP$  violation are transformed into superpositions of  $K_S$ ,  $K_L$  meson states and then arise interference of  $K_S$ ,  $K_L$  meson states but not oscillations. This picture is well in agreement with experiments. So we come to conclusion:  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations are realized through  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons, but not through  $K_S$ ,  $K_L$ .

**Key words and phrases:** mesons, weak interactions, oscillations, interference, strangeness, parity, violation, oscillations theory

## 1. Introduction

This work is devoted to the discussion of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations.

$K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are produced in strong interactions and their strangeness —  $S$  are  $S_{K^0} = +1$ ,  $S_{\bar{K}^0} = -1$ , and they consist of  $s$ ,  $d$  quarks; then  $\bar{K}^0 = s\bar{d}$  and  $K^0 = \bar{s}d$ . Since  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  consist of quarks that participate in weak interactions, then after their production there take place changes generated by weak interactions; there take place violation of strangeness —  $S$  and  $CP$  parity. Then, at violation of strangeness —  $S$  neutral  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are transformed into superposition of  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons:

$$K^0 = \frac{K_1^0 + K_2^0}{\sqrt{2}}, \quad \bar{K}^0 = \frac{K_1^0 - K_2^0}{\sqrt{2}}, \quad (1)$$

where  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons are eigenstates of the weak interaction that violates strangeness. Before the discovery of  $CP$  violation, it was assumed [1] that  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations arise though  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons. After the detection of  $CP$  violation [2,3] in literature [4,5], it was assumed that  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations go through  $K_S$ ,  $K_L$  mesons — eigenstates of weak interactions violating  $CP$  parity. Then, it is necessary to assume that (below we will give a more detailed consideration of this issue)

$$K^0 \simeq \frac{K_S + K_L}{\sqrt{2}}, \quad \bar{K}^0 \simeq \frac{K_S - K_L}{\sqrt{2}}. \quad (2)$$

It is necessary to remark that in modern literature [4,5] there is no mentioning of the existence of  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons. This issue demands a more detailed investigation.

Now lets proceed to the discussion of the following problem: how in reality there arise oscillations of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons?

## 2. The Theory of $K^0, \bar{K}^0$ meson oscillations

In the old theory of neutral  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations [6, 7] constructed in the framework of Quantum Mechanics, it is assumed that:

1.  $K^0, \bar{K}^0$  mesons are direct produced as superposition states of  $K_S, K_L$  meson states (see expr. (2)), i.e.,  $K^0 \cong \frac{1}{\sqrt{2}}(K_S + K_L)$  and  $\bar{K}^0 \cong \frac{1}{\sqrt{2}}(K_S - K_L)$ . This means that the  $K^0, \bar{K}^0$  mesons have no definite mass, i.e. their masses may vary in dependence on the  $K_S, K_L$  mesons admixture in the  $K^0, \bar{K}^0$  mesons states.
2. The mass eigenstates are  $K_S, K_L$  meson states, but not physical states of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons.
3.  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations are real (and indeed,  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations are real since masses of  $K^0$  and  $\bar{K}^0$  mesons are equal in agreement with *CPT* theorem [8]).

On the example of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons (eigenstates of the strong interactions), we can see that in duration of the time  $10^{-21}sec$  (typical time of the strong interactions), the  $K_S, K_L$  mesons-eigenstates of the weak interactions at *CP* violation cannot be produced, since their typical time is  $10^{-6}-10^{-8}$  sec. Besides, every particle must be produced on its mass shell and it will be left on its mass shell while passing through vacuum. It is clear that the above-considered picture has a defect and therefore calls for correction.

A statement that  $K^0, \bar{K}^0$  mesons are direct produced as superposition of  $K_S, K_L$  mesons, leads to a conclusion that there is not necessity to take into account that  $K^0, \bar{K}^0$  mesons have strangeness. Indeed, we have to proceed from the requirement that they have strangeness and they are transformed into superposition of  $K_1^0, K_2^0$  mesons at violation of strangeness — *S*, i.e.  $K^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_1^0 + K_2^0)$  and  $\bar{K}^0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(K_1^0 - K_2^0)$ . In principle, we can assume that  $K^0, \bar{K}^0$  mesons are transformed into superpositions of  $K_1^0, K_2^0$  mesons; and then they are quickly transformed into superpositions of  $K_S, K_L$  mesons. But this process is a dynamic one, and *CP* violation is a very slow process; and then, there will arise a time delay (a gap) at *CP* violation, i.e., at generation of  $K_S, K_L$  states (see work [9]). Besides in [3, 9] was shown that  $K_S, K_L$  states are nonorthogonal ones. Let us to consider it in more detail:

At the time of transition of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons in weak interactions into superpositions of  $K_1^0, K_2^0$  mesons, there takes place strangeness — *S* violation. Then, obviously,  $K_1^0, K_2^0$  mesons have no strangeness. In weak interactions there take place the following semi-leptonic decay of  $K^0 \rightarrow \pi^- e^+ \nu_e$  and  $\bar{K}^0 \rightarrow \pi^+ e^- \bar{\nu}_e$  mesons at strangeness — *S* violation.  $K_1^0$  meson has *CP* parity +1, and main mode of its decay are  $K_1^0 \rightarrow 2\pi$  mesons, while  $K_2^0$  meson has *CP* parity -1 and main mode of its decay is  $K_2^0 \rightarrow 3\pi$  mesons. It is necessary to remark that  $K_1^0, K_2^0$  mesons also have semi-leptonic mode  $\pi^- e^+ \nu_e, \pi^+ e^- \bar{\nu}_e$  decays, but since they are superpositions of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons, then their numbers are equal, and as stressed above, their strangeness equals to zero. In this case, there will arise oscillations [10]; and therefore,  $K^0 \rightarrow \bar{K}^0, \bar{K}^0 \rightarrow K^0$  transitions will arise. Probabilities of such transitions are produced by the following expressions [7] (it is necessary to assume that  $K_1^0, K_2^0$  meson states are quasistationary states until the time they will get transformed into superpositions of  $K_S, K_L$  mesons):

$$P(K^0 \rightarrow K^0) = P(\bar{K}^0 \rightarrow \bar{K}^0) = \frac{1}{4} \left[ e^{-\Gamma_1 t} + e^{-\Gamma_2 t} + 2e^{-\frac{(\Gamma_1 + \Gamma_2)t}{2}} \cos((m_2 - m_1)t) \right], \quad (3)$$

$$P(K^0 \rightarrow \bar{K}^0) = P(\bar{K}^0 \rightarrow K^0) = \frac{1}{4} \left[ e^{-\Gamma_1 t} + e^{-\Gamma_2 t} - 2e^{-\frac{(\Gamma_1 + \Gamma_2)t}{2}} \cos((m_1 - m_2)t) \right], \quad (4)$$

and expression for asymmetry is determined by the following formula:

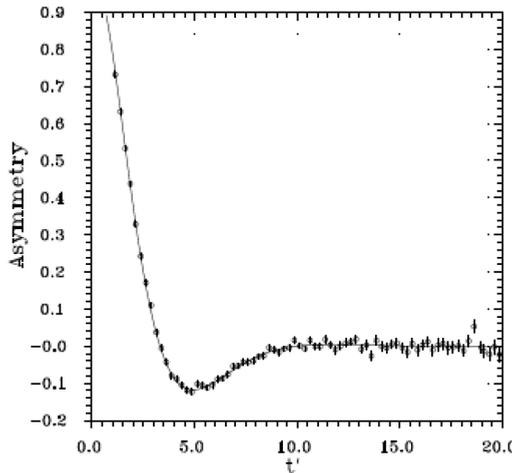
$$A_{th}^{12}(t) = \frac{[P(K^0 \rightarrow K^0, t) + P(\bar{K}^0 \rightarrow \bar{K}^0, t)] - [P(K^0 \rightarrow \bar{K}^0, t) + P(\bar{K}^0 \rightarrow K^0, t)]}{[P(K^0 \rightarrow K^0, t) + P(\bar{K}^0 \rightarrow \bar{K}^0, t)] + [P(K^0 \rightarrow \bar{K}^0, t) + P(\bar{K}^0 \rightarrow K^0, t)]} = \frac{2 \cos[(m_2 - m_1)t]e^{-(\Gamma_1 + \Gamma_2)t/2}}{e^{-\Gamma_1 t} + e^{-\Gamma_2 t}}. \quad (5)$$

If we are to substitute numerical value of parameters ( $\Gamma_1/\Gamma_2 = 580$ ,  $\Delta m_{12} = 0.533 \cdot 10^{-12}$  MeV,  $t' = t\Gamma_1$ ) in this expression, then we obtain:

$$A_{th}^{12}(t) = \frac{2 \cos[0.474t']e^{-0.5t'}}{e^{-t'} + e^{-0.00175t'}}. \quad (6)$$

Figure 1 gives experimental data obtained in work [5] together with the curve obtained by using expression (6). It is necessary to stress that these data were interpreted in [5] as  $K^0, \bar{K}^0$  oscillations via  $K_S, K_L$  mesons. It is important to stress that these states are nonorthogonal states [3, 9] therefore they cannot be used for oscillations generation. For this aim can be used only orthogonal states (i.e.,  $K_1^0, K_2^0$  orthogonal states).

We see that expression (6) for asymmetry is well in agreement with experimental data. Also, it is necessary to remark that the work [5] has not taken into account that at  $CP$  violation there has to be present phase  $\delta = 43.5^\circ$ . This phase has to be present if it is suggested that there are produced superposition states of  $K_S, K_L$  mesons (see [10]). In a case of strangeness violation this phase does not appear. From Figure 1 we can make a conclusion that  $K^0, \bar{K}^0$  mesons oscillations come to an end in region  $t' \geq (7-8)$  ( $t' = \frac{t}{\tau_c}$ , where  $\tau_c = 0.892 \cdot 10^{-10}$  sec.). These  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations come to an end, since these oscillations are realized via  $K_1^0, K_2^0$  meson states; but since  $K_1^0$  mesons decay quickly, then they will be existent mainly in present long living  $K_2^0$  mesons. Then, condition for  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations is not fulfilled [11].



**Figure 1.** A curve obtained from expression (6) together with experimental data obtained in work [5].

Then, what will there arise in the system of  $K_1^0, K_2^0$  mesons? Since weak interactions violate  $CP$  parity, then  $K_1^0, K_2^0$  mesons will be transformed into superposition states of  $K_S, K_L$  mesons (eigenstates at  $CP$  violation). It is important to remark that  $K^0, \bar{K}^0$  cannot be direct transformed into superpositions of  $K_S, K_L$  mesons since they appear

only at  $CP$  violation but not at strangeness violation. Also, it is necessary to remark that weak interactions with  $CP$  violation are a slow process, and it becomes strongly apparent at  $t' \geq (7-8)\tau_c$  (see below), i.e., only at  $t' \geq (7-8)\tau_c$  the main part of  $K_1^0, K_2^0$  mesons has time to be transformed into superposition of  $K_S, K_L$  mesons; although such superposition states start appearing direct after the ascent of  $K_1^0, K_2^0$  meson states).

Then,  $K_1^0, K_2^0$  mesons are transformed in the following superpositions of  $K_S, K_L$  mesons:

$$\begin{aligned} K_1^0 &= \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon^2}}(K_S + \varepsilon K_L), \\ K_2^0 &= \frac{1}{\sqrt{1 + \varepsilon^2}}(K_L + \varepsilon K_S). \end{aligned} \tag{7}$$

where  $\varepsilon = |\varepsilon|e^{-i\delta}$ .

Now there emerges the following question: Do oscillations between  $K_1^0, K_2^0$  meson states take place via  $K_S, K_L$  mesons, or there takes place only interference between these  $K_S, K_L$  states? The problem of oscillations existence at  $CP$  violation was consider in work [9] in detail (see also work [12]). There following conclusion was made: all existent experimental data on  $CP$  violation are well in agreement with theoretical calculations in the case when there takes place interference between  $K_S, K_L$  states, but not oscillations. It means that at  $CP$  violation oscillations do not arise and these states are not orthogonal states. As an illustration, we consider a figure and some expressions from work [9].

$K_S, K_L$  meson states are stationary states, and then their expressions for time dependence are determined by the following formulas:

$$K_S(t) = e^{(-im_S - \Gamma_S/2)t} K_S(0), \quad K_L(t) = e^{(-im_L - \Gamma_L/2)t} K_L(0), \tag{8}$$

where  $\Gamma_S, \Gamma_L, m_S, m_L$  are widths of decays and masses of  $K_S, K_L$  mesons.

Expressions for probabilities of interference of  $K_S, K_L$  mesons is obtained by using (8) and (7) have the following form:

$$\begin{aligned} P(K^0, K_1 \rightarrow K_1, t) &\simeq \\ &\simeq \frac{1}{2} \left[ e^{(-\Gamma_S t)} + |\varepsilon|^2 e^{(-\Gamma_L t)} + 2|\varepsilon| e^{(\frac{1}{2}(\Gamma_S + \Gamma_L)t)} \cos((m_L - m_S)t - \delta) \right], \end{aligned} \tag{9}$$

$$\begin{aligned} P(\bar{K}^0, K_1 \rightarrow K_1, t) &\simeq \\ &\simeq \frac{1}{2} \left[ e^{(-\Gamma_S t)} + |\varepsilon|^2 e^{(-\Gamma_L t)} - 2|\varepsilon| e^{(\frac{1}{2}(\Gamma_S + \Gamma_L)t)} \cos((m_L - m_S)t - \delta) \right]. \end{aligned} \tag{10}$$

An expression for asymmetry  $A_{th}(t)$  obtained by using expr. (9), (10) has the following form:

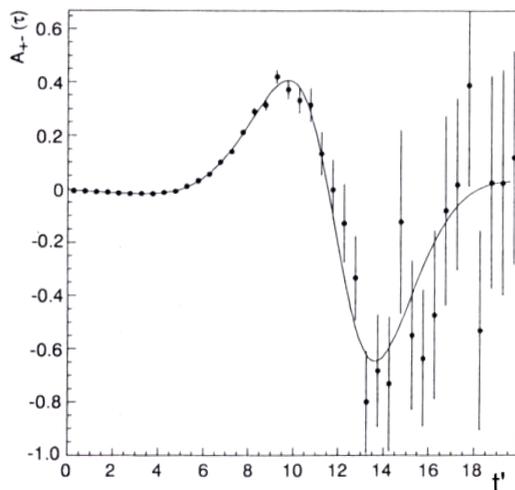
$$\begin{aligned} A_{th}(t) &= \frac{P(\bar{K}^0, K_1^0 \rightarrow K_1^0, t) - P(K^0, K_1^0 \rightarrow K_1^0, t)}{P(\bar{K}^0, K_1^0 \rightarrow K_1^0, t) + P(K^0, K_1^0 \rightarrow K_1^0, t)} = \\ &= - \frac{2\varepsilon \cos[(m_L - m_S)t - \delta] e^{-(\Gamma_S + \Gamma_L)t/2}}{e^{-\Gamma_S t} + \varepsilon^2 e^{-\Gamma_L t}}. \end{aligned} \tag{11}$$

If we substitute value parameters  $\delta = 43.5^\circ$ ,  $\Gamma_S = \frac{1}{\tau_c}$ ,  $\Gamma_L$ ,  $\varepsilon = 2.23 \cdot 10^{-3}$ ,  $\Delta m_{LS} \cong \Delta m_{12}$  in (11), then we obtain:

$$A_{th}(t') = - \frac{2 \cdot 0.00223 [\cos(0.477t - 0.751)] e^{-t'(581/1160)}}{e^{-t'} + (0.00223)^2 e^{-t'/580}}. \quad (12)$$

Figure 2 shows a curve line obtained by the use of expression (12) together with experimental data obtained in work [3].

The asymmetry  $A_{th}(t')$  connected with  $CP$  violation become nonzero at  $t' > (7-8)$ , i.e.,  $CP$  violation begins to be evident not direct at  $t_c = 0$ , but at  $t' > (7-8)$ ; and asymmetry connected with strangeness —  $S$  violation appears at  $t' = 0$ : (7-8).



**Figure 2.** A curve line obtained by the use of expression (12) together with experimental data obtained in work [3].

Expression (12) is in agreement with experimental data obtained in [3] at  $CP$  violation.  $K_S, K_L$  meson states are stationary states (i.e., they have definite masses); further, since  $CPT$  is not violated, nothing will further arise.

Thus, from the above-considered experimental data we come to a conclusion that  $K^0, \bar{K}^0$  mesons cannot be direct produced as superpositions of  $K_S, K_L$  mesons that are eigenstates at  $CP$  violation. If  $K^0, \bar{K}^0$  mesons could be direct transformed into superpositions of nonorthogonal  $K_S, K_L$  meson states then there can arise only interference between  $K_S, K_L$  states but not  $K^0, \bar{K}^0$  meson oscillations. Experiment [3] and calculation [9] has shown that at  $CP$  violation arises only interference but not oscillations.

As a matter of fact,  $K^0, \bar{K}^0$  mesons have to be transformed into superpositions of  $K_1^0, K_2^0$  mesons at violation of strangeness —  $S$ , and further there take place oscillations (it is important to remark that  $K_1^0, K_2^0$  states are orthogonal quasistationary ones). Then  $K_1^0, K_2^0$  mesons are transformed into superposition of  $K_S, K_L$  mesons; and then, there will take place interference between these states. Such picture is well in agreement with experimental data [3,5]. As we see we cannot ignore  $K_1^0, K_2^0$  meson states in the system of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons, and these two processes are realized at different time intervals.

We see that the idea that these both processes — oscillations and interference- can be realized only through  $K_S, K_L$  states, has no confirmation in the framework of the standard approach.

Therefore, we have to fulfill some adjustment to the theory of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  oscillations. Following that, points 1–3 in the beginning of this section obtain the following form:

1.  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are produced in strong interactions, and at strangeness violation by weak interactions, they are transformed into superposition states of  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons (see expr. (1)); and  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are in their mass shell.
2.  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  meson states are quasistationary states before  $CP$  violation, and they have definite masses.
3.  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations are real since masses of  $K^0$  and  $\bar{K}^0$  mesons are equal in agreement with  $CPT$  theorem [8].

### 3. Conclusion

In the standard theory of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations, it is assumed that  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are direct produced as superpositions of  $K_S$ ,  $K_L$  mesons (indeed,  $K_S$ ,  $K_L$  mesons are produced in weak interactions at  $CP$  violation). Then,  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations have to be realized through these  $K_S$ ,  $K_L$  mesons and then these mesons are stationary states. In reality in weak interactions takes place violation of strangeness —  $S$  and  $CP$  parity. Eigenstates at strangeness -  $S$  violation are  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  orthogonal meson states, and eigenstates at  $CP$  violation are non orthogonal  $K_S$ ,  $K_L$  meson states. At strangeness violation, primary  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  mesons are transformed into superposition of  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  mesons; and then there arise  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations. The  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  states are quasistationary states. Further at  $CP$  violation,  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  states are transformed into superpositions of  $K_S$ ,  $K_L$  mesons; then, interference between these  $K_S$ ,  $K_L$  mesons states arises instead of oscillations. The  $K_S$ ,  $K_L$  states are stationary states. This picture is well in agreement with experiment [3, 5]. We see that standard theory of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  meson oscillations is not in agreement with the experimental data. Indeed,  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  oscillations go through  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  states, but not through  $K_S$ ,  $K_L$  states.

### References

1. L. B. Okun, *Leptons and Quarks*, Nauka, Moscow, 1982, in Russian.
2. J. H. Christenson, et al., Evidence for the Decay of the  $K_2^0$  Meson, *Phys. Rev. Lett.* 13 (1964) 138.
3. A. Aposotolakis, et al., A Determination of the  $\eta_{\pm}$  Violation Parameter from the Decay of Strangeness-Tagged Neutral Kaons, *Phys. Lett.* B458 (1999) 545.
4. J. Beringer, et al., *Phys Rev. D* 86 (2012) 010001.
5. A. Angelopoulos, et al., Measurement of the  $K_S$ ,  $K_L$  Mass Difference Using Semileptonic Decays of Tagged Neutral Kaons, *Phys. Letters* B444 (1998) 38.
6. V. Gribov, B. M. Pontecorvo, Neutrino Astronomy and Lepton Charge, *Phys. Lett.* B 28 (1969) 493.
7. S. M. Bilenky, B. M. Pontecorvo, Lepton Mixing and Neutrino Oscillations, *Phys. Rep.* C41 (1978) 225.
8. S. S. Shweber, *An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory*, Nauka, Moscow, 1963, in Russian.
9. K. M. Beshtoev, About Absence of Oscillations at  $CP$  Violation and Presence of Interference between  $K_S$ ,  $K_L$  Meson States in the System of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  Mesons, *Physics of Particles and Nuclei Letters* 13 (2016) 46.
10. K. M. Beshtoev, S. Dubnicha, A. Z. Dubnichkova, Are  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  Real Particles or They are Some Theoretical Fiction, 16<sup>th</sup> Small Triangle Meeting, Pticie, October 5-8 (2014).

11. K. M. Beshtoev, About  $K^0, \bar{K}^0$  Meson Oscillations at Strangeness Violation by Weak Interactions without and with Taking into Account Meson Decays, UFN In Russian, arXiv:hep-ph/1303.1815v.1.
12. K. M. Beshtoev, About Absence of Oscillations at  $CP$  Violation and Presence of Interference between  $K_S, K_L$  Meson States in the System of  $K^0, \bar{K}^0$  mesons, JINR Communication E2-2014-63ArXiv:1401.5989v2 [hep-ph].

УДК 539.123-539.12.01

## Замечания к стандартной теории осцилляции $K^0, \bar{K}^0$ мезонов. Нарушение странности — $S$ и $CP$ чётности в слабых взаимодействиях в системе $K^0, \bar{K}^0$ мезонов

Х. М. Бештоев

*Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации  
г. Нальчик, Кабардино-Балкарская республика, Россия*

Обычно предполагается, что  $K^0, \bar{K}^0$  мезонные осцилляции реализуются через  $K_S, K_L$  мезонные состояния. Нужно заметить, что  $K_S, K_L$  мезонные состояния возникают при нарушении  $CP$  чётности в слабых взаимодействиях, и кроме этого, эти состояния не являются ортогональными и поэтому они не могут генерировать  $K^0, \bar{K}^0$  мезонные осцилляции. На самом деле, при нарушении странности —  $S, K^0, \bar{K}^0$  мезоны превращаются в суперпозиционные состояния ортогональных  $K_1^0, K_2^0$  мезонных состояний, и далее через эти состояния возникают  $K^0, \bar{K}^0$  осцилляции. В дальнейшем при  $CP$  нарушении  $K_1^0, K_2^0$  мезоны превращаются в суперпозиционные состояния  $K_S, K_L$  мезонов, и далее возникает интерференция между этими  $K_S, K_L$  мезонными состояниями, но осцилляции при этом не возникают. Такая картина находится в хорошем согласии с экспериментом. Итак, приходим к заключению: осцилляции  $K^0, \bar{K}^0$  мезонов реализуется через  $K_1^0, K_2^0$  мезоны, а не через  $K_S, K_L$  мезоны.

**Ключевые слова:** мезоны, слабые взаимодействия, осцилляции, интерференция, странность, чётность, нарушение, теория осцилляции

## Литература

1. *Ожунь Л. Б.* Лептоны и кварки. — М.: Наука, 1982. — С. 77, 85.
2. *Christenson J. H. et al.* Evidence for the Decay of the  $K_2^0$  Meson // Phys. Rev. Lett. — 1964. — Vol. 13. — P. 138.
3. *Aposotolakis A. et al.* A Determination of the  $\eta_{\pm}$  Violation Parameter from the Decay of Strangeness-Tagged Neutral Kaons // Phys. Lett. — 1999. — Vol. B458. — P. 545.
4. *Beringer J. et al.* // Phys. Rev. D. — 2012. — Vol. 86. — P. 010001.
5. *Angelopoulos A. et al.* Measurement of the  $K_S, K_L$  Mass Difference Using Semileptonic Decays of Tagged Neutral Kaons // Phys. Lett. — 1998. — Vol. B444. — P. 38.
6. *Gribov V., Pontecorvo B. M.* Neutrino Astronomy and Lepton Charge // Phys. Lett. B. — 1969. — Vol. 28. — P. 493.
7. *Bilenky S. M., Pontecorvo B. M.* Lepton Mixing and Neutrino Oscillations // Phys. Rep. — 1978. — Vol. C41. — P. 225.
8. *Швебер С. С.* Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. — М.: Наука, 1963.
9. *Beshtoev K. M.* About Absence of Oscillations at  $CP$  Violation and Presence of Interference Between  $K_S, K_L$  Meson States in the System of  $K^0, \bar{K}^0$  Mesons // Physics of Particles and Nuclei Letters. — 2016. — Vol. 13. — P. 46.

10. *Beshtoev K. M., Dubnicha S., Dubnichkova A. Z.* Are  $K_1^0$ ,  $K_2^0$  Real Particles or They are Some Theoretical Fiction. — 2014. — 16<sup>th</sup> Small Triangle Meeting, Pticie, October 5-8. 16<sup>th</sup> Small Triangle Meeting, Pticie, October 5-8.
11. *Beshtoev K. M.* About  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  Meson Oscillations at Strangeness Violation by Weak Interactions without and with Taking into Account Meson Decays // УФН. — 2013.
12. *Beshtoev K. M.* About Absence of Oscillations at  $CP$  Violation and Presence of Interference between  $K_S$ ,  $K_L$  Meson States in the System of  $K^0$ ,  $\bar{K}^0$  Mesons // JINR Communication E2-2014-63. — 2014. — ArXiv:1401.5989v2 [hep-ph].

© Beshtoev Kh. M., 2016

## СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

- Алиев Самир Алиевич** — аспирант кафедры прикладной физики РУДН
- Алхуссаян Аmani** (Сирия) — аспирант кафедры информационных технологий РУДН (e-mail: amanie-alhussain@hotmail.com)
- Амабили Марко** (Канада) — профессор и ведущий ученый кафедры машиностроения, Университет МакГилл, Монреаль, Канада (e-mail: marco.amabili@mcgill.ca)
- Башарин Гелий Павлович** — Заслуженный деятель науки РФ, профессор, доктор технических наук, профессор-консультант кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: gbasharin@sci.pfu.edu.ru)
- Беляева Ирина Николаевна** — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методик преподавания Белгородского государственного национального исследовательского университета (e-mail: ibelyaeva@bsu.edu.ru, тел.: +79155780881)
- Бештоев Хамидби Мухамедович** — доктор физико-математических наук, ВНС отдела ММГП Научно-исследовательского института прикладной математики и автоматизации, г. Нальчик
- Гайдамака Юлия Васильевна** — доцент, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: ygaidamaka@mail.ru, тел.: +7(495)9550999)
- Гарзиера Ринальдо** (Италия) — профессор, заведующий кафедрой промышленной инженерии, Университет Пармы, Италия (e-mail: rinaldo.garziера@gmail.com)
- Горбачёв Александр Владимирович** — аспирант кафедры теоретической физики и механики РУДН (e-mail: alexarus1986@gmail.com)
- Зорин Александр Валерьевич** — доцент, кандидат физико-математических наук, заведующий сектором научно-исследовательской лаборатории вычислительной физики и математического моделирования РУДН (e-mail: zorin@rudn.ru)
- Любин Павел Геннадьевич** — аспирант кафедры прикладной математики ГОУ ВО МГТУ «Станкин» (e-mail: lyubin.p@gmail.com)
- Мухарлямов Роберт Гарабшевич** — профессор, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и механики РУДН (e-mail: robgar@mail.ru)
- Русина Надежда Владимировна** — аспирант кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН; системный аналитик аналитического отдела ЗАО «СФЕРА» (e-mail: rusina\_nadezda@inbox.ru, тел.: +7(916)4031244)
- Рябова Ксения Сергеевна** — аспирант кафедры промышленной инженерии, Университет Пармы, Италия (e-mail: kseniia.riabova@studenti.unipr.it)
- Севастьянов Леонид Антонович** — профессор, доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной информатики и теории вероятностей РУДН (e-mail: leonid.sevast@gmail.com, тел.: +7(495)9522572)
- Стефанюк Вадим Львович** — профессор, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник ИППИ РАН, профессор кафедры информационных технологий РУДН (e-mail: stefanukv@iitp.ru)
- Чеканова Наталья Николаевна** — кандидат физико-математических наук, доцент кафедры информационных технологий Харьковского института банковского дела (e-mail: chekanova76@list.ru, тел.: +1038633066068)
- Чеканов Николай Александрович** — доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей математики Белгородского государственного национального исследовательского университета (e-mail: chekanov@bsu.edu.ru, тел.: +79087849091)

## ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ СТАТЕЙ

Редколлегия журнала «Вестник Российского университета дружбы народов», серия «Математика. Информатика. Физика» просит авторов придерживаться следующих правил при представлении статьи в журнал.

1. Статьи представляются на русском или английском языке.
2. Объём статьи не должен превышать 0,75 авт. печ. л.
3. Автор представляет в редакцию электронную версию рукописи, набранную в системе  $\text{\LaTeX}$  (используется версия  $\text{\LaTeX} 2_{\epsilon}$ , для набора формул используется макропакет  $\mathcal{A}\mathcal{M}\mathcal{S}\text{-}\text{\LaTeX}$ ). К электронному варианту прилагается отпечатанный на бумаге экземпляр или файл в формате Postscript или PDF. Для каждой статьи указываются коды УДК и MSC (PACS).
4. Название, аннотация, ключевые слова, фамилии и инициалы авторов, название организации, где работают авторы, предоставляются на русском и английском языках.
5. Аннотация (от 150 до 250 слов) должна описывать основные цели исследования; объяснять, как было проведено исследование, без методологических деталей; суммировать наиболее важные результаты и их значение; быть написана качественным русским/английским языком. В аннотации не допускаются ссылки на цитированную литературу, аббревиатуры и громоздкие формулы.
6. Текст статьи должен включать введение, заключение, список использованных источников (не менее 5). Глубина разбивки текста не должна превышать трёх уровней (разделы, пункты и подпункты).
7. Рисунки принимаются в электронном виде. Каждый рисунок должен быть помещён в отдельный файл. Принимаемые форматы файлов: 1) векторные: PDF, EPS,  $\text{\TeX}$ ; 2) растровые: PNG, TIFF, GIF (возможна инкапсуляция в EPS).
8. Размер рисунка вместе с подписью не должен превышать 14x19 см. Разрешение растрового рисунка должно находиться в пределах 300–600 dpi.
9. Рисунки должны быть чёрно-белые. Возможность использования полутоновых и фотографических изображений может быть рассмотрена отдельно. Фоны должны быть только штрихованные. Сеточные фоны и полутона не допускаются.
10. Список литературы подготавливается в системе  $\text{\BibTeX}$  и представляется в двух отдельных файлах — по требованиям ГОСТ 7.1-84 (смешанный список источников на русском и других языках) и по стандарту Harvard (полностью на иностранном языке (англ., франц., нем., исп.)); для источников на русском языке требуется перевод на английский язык). Ссылки на неопубликованные работы не допускаются.
11. Рукопись должна быть тщательно выверена. Необходимо указать точные сведения об авторах: фамилию, имя, отчество полностью, учёную степень, учёное звание, должность с указанием подразделения и организации, почтовый и электронный адрес места работы авторов и телефоны. После подготовки редакцией к набору размеченный и исправленный автором текст статьи и исправленная электронная версия возвращаются в редакцию. Корректурa для просмотра высылается по e-mail.
12. Возвращение статьи автору на доработку не означает, что она принята к опубликованию. Доработанный вариант статьи редколлегия рассматривает вновь. В случае отклонения статьи редколлегия оставляет за собой право не возвращать автору один её экземпляр.
13. Все статьи, планируемые к публикации в журнале, проходят обязательную процедуру рецензирования двумя рецензентами, являющимися экспертами в данной области. Один из рецензентов может быть выбран из состава редколлегии (внутреннее рецензирование). В обязательном порядке статья направляется независимому эксперту (на внешнее рецензирование). Процедура рецензирования является анонимной для авторов. По результатам рецензирования статья может быть отклонена, направлена автору на доработку или принята к печати. Требования к рецензиям:

оценка существа работы и возможности её публикации в журнале; конкретное перечисление ошибок в методологии и инструментарии (если они есть); предложения по доработке текста.

14. При получении положительного заключения рецензента материалы помещаются в «портфель» редакции для дальнейшего опубликования. При получении отрицательного заключения одного из рецензентов статья рассматривается на заседании редакционной коллегии, которая принимает решение об отклонении статьи или о необходимости получения дополнительной рецензии независимого эксперта.

Контактный адрес для решения технических вопросов по предоставляемым материалам в журнал Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика»: Россия, Москва, ул. Орджоникидзе, д. 3, комн. 313; e-mail: [vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru](mailto:vestnik-miph@sci.pfu.edu.ru).

Адрес для переписки: 117198, Россия, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, факультет физико-математических и естественных наук, профессору Севастьянову Л. А.

ф. СП-1

ФГУП «ПОЧТА РОССИИ»

АБОНЕМЕНТ на журнал

**18235**

(индекс издания)

**ВЕСТНИК РУДН**  
**Серия «Математика.**  
**Информатика. Физика»**

Количество  
комплектов:

на 20\_\_ год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)

**ДОСТАВОЧНАЯ КАРТОЧКА**

на журнал

**18235**

(индекс издания)

ПВ	место	литер

**ВЕСТНИК РУДН**

**Серия «Математика. Информатика. Физика»**

Стоимость	подписки	_____ руб. ___ коп.	Количество комплектов:	
	переадресовки	_____ руб. ___ коп.		

на 20\_\_ год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)

ф. СП-1

ФГУП «ПОЧТА РОССИИ»

АБОНЕМЕНТ на журнал

--

(индекс издания)

**ВЕСТНИК РУДН**

Серия \_\_\_\_\_

Количество комплектов:

--

на 2010 год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)

**ДОСТАВОЧНАЯ КАРТОЧКА**

на журнал

--

(индекс издания)

ПВ	место	лигер

**ВЕСТНИК РУДН**

Серия \_\_\_\_\_

Стоимость	подписки	_____ руб. ___ коп.	Количество комплектов:	
	переадресовки	_____ руб. ___ коп.		

на 2010 год по месяцам

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12

Куда

(почтовый индекс)

(адрес)

Кому

(фамилия, инициалы)

Научный журнал  
**ВЕСТНИК**  
Российского университета дружбы народов

Серия  
**МАТЕМАТИКА. ИНФОРМАТИКА. ФИЗИКА**  
2016, № 2

Издание зарегистрировано Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций (Роскомнадзор)

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС 77-61205 от 30.03.2015 г.

Учредитель: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Российский университет дружбы народов» (ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Москва, Россия, 117198)

**Редактор** *К. В. Зенкин*  
**Компьютерная вёрстка:** *А. В. Королькова*

**Адрес редакции:**  
Российский университет дружбы народов  
ул. Орджоникидзе, 3, г. Москва, Россия, 115419  
тел. +7(495)955-07-16, e-mail: [ipk@pfur.ru](mailto:ipk@pfur.ru)

**Адрес редакционной коллегии**  
**серии «Математика. Информатика. Физика»:**  
ул. Орджоникидзе, 3, комн. 313, г. Москва, Россия, 115419  
тел. +7(495) 952-02-50, email: [mathitphysjournalrudn@pfur.ru](mailto:mathitphysjournalrudn@pfur.ru)  
сайт: <http://vestnik-miph.sci.pfu.edu.ru>

---

Подписано в печать 01.06.2016. Выход в свет 10.06.2016. Формат 70×100/16.  
Бумага офсетная. Печать офсетная. Гарнитура «Computer Modern».  
Усл. печ. л. 11,68 Тираж 500 экз. Заказ № 429

Цена свободная

Типография ИПК РУДН  
ул. Орджоникидзе, 3, ГСП-1, г. Москва, Россия, 115419, тел. 952-04-41

Scientific journal  
**BULLETIN**  
of Peoples' Friendship University of Russia

Series  
**MATHEMATICS. INFORMATION SCIENCES. PHYSICS**  
2016, № 2

Editor *K. V. Zenkin*  
Computer design: *A. V. Korolkova*

**Address of editorial board:**  
Peoples' Friendship University of Russia  
Ordzhonikidze str., 3, Moscow, Russia, 115419  
Tel. +7 (495) 955-07-16, e-mail: [ipk@pfur.ru](mailto:ipk@pfur.ru)

**Address of editorial board**  
**series "Mathematics. Information Sciences. Physics":**  
Ordzhonikidze str., 3, Moscow, Russia, 115419  
Tel. +7 (495) 952-02-50, email: [mathitphysjournalrudn@pfur.ru](mailto:mathitphysjournalrudn@pfur.ru)  
site: <http://vestnik-miph.sci.pfu.edu.ru>

---

Printing run 500 copies

Open price

**Address of PFUR publishing house**  
Ordzhonikidze str., 3, Moscow, Russia, 115419  
Tel. +7 (495) 952-04-41