$$Y(x,s,\lambda)=\begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \lambda^{\frac{1}{m-n}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \lambda^{\frac{(m-n)-1}{m-n}} \end{pmatrix} \cdot Z(x,s,\lambda)=\Re(\lambda)\cdot Z(x,s,\lambda).$$

Порядок функції $\Re(\lambda)\in\Im(I^{m\times m})$ як многочлена відносно λ дорівнює нулеві. Тому порядок цілої функції $Y(x,s,\lambda)$

$$\rho\le\max\left(0,\frac{1}{m-n}\right)=\frac{1}{m-n},$$

що й завершує доведення теореми.

Наслідок. Якщо диференціальні вирази $M[y]$ і $N[y]$ такі, що $m-n>1$, то всі невироджені розв'язки рівняння (1) є цілими функціями параметра λ нульового роду.

1. Левин Б.Я. Распределение корней целых функций. М., 1956. 2. Титчмарш Е. Теория функций / Пер. с англ. М., 1980. 3. Таций Р.М. О порядке роста характеристического ряда // Математ. методы и физ.-мех. поля. 1981. № 13. С. 38–48. 4. Халанай А., Векслер Д. Качественная теория импульсных систем / Пер. с рум. М., 1971. 5. Стасюк М.Ф., Таций Р.М. Корректные дифференциальные уравнения с мерами // Вестн. Львов. политехн. ин-та. 1988. № 222. С. 89–90. 6. Пахолок Б.Б. Об одном неравенстве типа Гронуолла – Беллмана // Вестн. Львов. политехн. ин-та. 1989. № 232. С. 109–110. 7. Мазуренко В.В. Про порядок зростання розв'язків векторного квазідиференціального рівняння другого порядку як функцій параметра // Вісн. ДУ "Львівська політехніка". 1999. № 364. С. 83–87. 8. Якубович В.А., Старжинский В.М. Линейные дифференциальные уравнения с периодическими коэффициентами и их приложения. М., 1972.

УДК 539.3:537.22

Ткачук О.М, Дудка О.М., Ткачук В.М.
Прикарпатський університет ім. В. Стефаника, Ів.-Франківськ

ПРОБЛЕМА МАТЕМАТИЧНОЇ ОБРОБКИ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ МЕССБАУЕРІВСЬКИХ СПЕКТРІВ

The effectivity of the usage of the regularization method as alternative to the least squares fitting for the mathematical analysis of the mossbauer spectroscopy results have been analyzed.

Проаналізовано ефективність використання методу регуляризації як альтернативи методові найменших квадратів для математичного аналізу результатів мессбауерівської спектроскопії.

Широке використання числового аналізу даних експерименту з використанням методу найменших квадратів, особливо при близькості параметрів різних нееквівалентних станів, вимагає введення додаткових критеріїв оцінки достовірності отримуваних результатів. Так, при аналізі фізичних даних це може бути або умова невід'ємності розв'язку, або умова достатньої гладкості.

Так, при числовому аналізі експериментальних мессбауерівських спектрів внаслідок наявності на резонансному ядрі одночасно магнітної дипольної та електричної квадрупольної взаємодії використання традиційних підходів, що базуються на методі найменших квадратів, значно ускладнюється. Такий підхід, як показали наші дослідження, внаслідок малої рознесеності парціальних підспектрів, переважно, дає або наперед неправильний результат, або виникають значні труднощі при його фізичній інтерпретації.

Обробка мессбауерівського спектра, зумовленого одночасною дією магнітної дипольної та електричної квадрупольної взаємодій, проводиться в два етапи. На першому спектр розкладається на складові компоненти у вигляді лінійної суперпозиції парціальних підспектрів :

$$N_i = N_0 + \sum_{j=1}^{6} \frac{A_i}{1 + 4/\Gamma_\varphi^2 \cdot (v_\iota - \delta - B_\iota x)},$$

де i – номер каналу; A_i - відношення інтенсивностей ліній в секстиплеті; Γ_ι – ширина лінії; v_ι – доплерівська швидкість в і-му каналі; B_i – ядерні константи; x – величина, що визначається значенням магнітного поля, квадрупольного розщеплення та ізомерного зсуву.

Традиційно задача аналізу спектра зводиться до знаходження такого набору значень параметрів парціальних підспектрів a_i, які б мінімізували суму:

$$S = \sum_{j-1}^{n} \left[N_i - f(a_1, \ldots, a_m, x_j) \right]^2 \tag{1}$$

де N_i – експериментальний спектр; x_j – величина, що визначається значенням магнітного поля, квадрупольного розщеплення та ізомерного зсуву для кожного парціального підспектра; m – число змінюваних параметрів надтонкої взаємодії; n – кількість експериментальних точок (каналів аналізатора).

При використанні методу регуляризації застосовують квазінеперервний підхід до опису мессбауерівського спектра для знаходження розподілу параметрів надтонких взаємодій на резонансному ядрі. Суть такого підходу зводиться до представлення експериментальної резонансної кривої у вигляді лінійної суперпозиції квазінеперервно розподілених "підспектрів", що відрізняються тим чи іншим параметром надтонкої взаємодії

$$\varepsilon(v_j) = \sum_{i=1}^{l} P_i \cdot f(H_i, v_j), \tag{2}$$

де $f(H_i, v_j)$ – зеєманівський секстет ліній із розщепленням, пропорційним до надтонкої взаємодії H_i, P_i – густина імовірності даного секстиплету. Значення P_i знаходять з умови:

$$\frac{\partial}{\partial p_k} \left[\sum_{j=1}^{R} [\varepsilon^0(v_j) - \varepsilon(v_j)]^2 + \gamma \sum_{\iota=1}^{\lambda-1} (P_{i-1} - 2P_i + P_{i+1})^2 \right] = 0 \tag{3}$$

та умови нормування

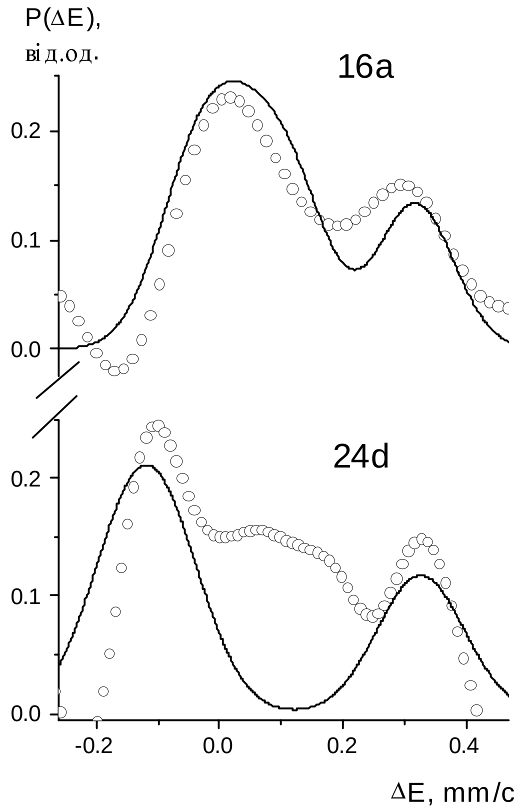
$$\int_{0}^{H_{max}} P(H)dH = 1 \tag{4}$$

Тут γ – параметр регуляризації, який підбирають експериментально з умови отримання “гладкого” та фізичного розв’язку. Випадок γ=0 відповідає класичному методу найменших квадратів, який при практичному використанні дає з математичної точки зору правильні розв’язки, які, однак, не мають фізичного змісту.

Практична реалізація методу вимагає розв’язання систем лінійних рівнянь високих порядків, максимальна розмірність яких визначається кількістю каналів аналізатора. Незалежності отримуваного результату від кількості вибраних точок при розумних затратах машинного часу, як показує аналіз, досягають про розгляді системи 100–150 рівнянь виду

$$\sum_{j=1}^{R}[\varepsilon^{0}(\nu_j)-\varepsilon(\nu_j)]\cdot f(x,\nu_j)+\gamma(P_{j-2}-4P_{j-1}+6P_j-4P_{j+1}+P_{j+2})=0 \tag{5}$$

Проблема вибору параметра γ полягає в тому, що його величину доводиться підбирати, виходячи з двох взаємовиключних вимог. Це – забезпечення високої роздільної здатності, яку отримують при прямуванні γ до 0, та фізичності розв’язку, який забезпечується при значеннях γ, відмінних від 0.



Функція розподілу квадрупольного розщеплення
на мессбауерівському ядрі у ферит-гранатовій плівці:
точки –математична обробка експерименту, лінія –теоретична крива.
Розрахунок зроблено для підґраток заліза 24a та 16d.

В основу практичної реалізації методу покладено запропонований в [1] підхід. Розроблена методика розрахунку мессбауерівських спектрів була апробована при аналізі квадрупольного розщеплення у ферит-гранаті ітрію. Форма елементарних складових секстиплету задавалася рівнянням:

$$f(x,\nu_j)=\sum_{i=1}^{6}\frac{A_i}{1+4/\Gamma^2(\nu_j-c-B_i x)^2}. \tag{6}$$

Вектор $\vec{B}$ визначається ядерними константами $\vec{B}=\{0.5;0.289;0.079;–0.079;–0.289;–0.5\}$.

Величина с – положення центра ваги спектра, яка може бути визначена з умови:

$$c=\sum_{j=1}^{R}\nu_j\varepsilon^0(\nu_j)/\sum_{j=1}^{R}\varepsilon^0(\nu_j). \tag{7}$$

Результат використання описаного підходу до аналізу експериментального спектра та теоретичний вигляд функції P(ΔE), отриманий, виходячи з кристалографічної структури зразка, наведено на рисунку. Задовільна кореляція між теоретичною та експериментальною кривими свідчить про коректність використаного методу до такого роду розрахунків.

Запропонований підхід було реалізовано для аналізу функції розподілу надтонкого магнітного поля на ядрах заліза [2], де показано ефективність використання цього класу задач для аналізу процесів іонної імплантації.

1. Литвинов В.С., Каракишев С.Д., Овчинников В.В. Ядерная гамма-резонансная спектроскопия металлов и сплавов. М., 1982. 2. Tkachuk O.M., Tkachuk V.M. The Local Magnetic $Y_3Fe_5O_{12}$ Structure Implanted by As Ions // Phys. Stat. Sol.(a). 1999. b.172. P.477–484.

УДК 517.948/517.946

Угрин С.З.

НУ "Львівська політехніка", кафедра обчислювальної математики і програмування

СИСТЕМИ ДВОСТОРОННІХ ДИФЕРЕНЦІАЛЬНИХ НЕРІВНОСТЕЙ З B-КВАЗІМОНОТОННИМИ ПРАВИМИ ЧАСТИНАМИ

Theorems on systems of twosided differential inegualities with ordinary derivatives under assumptions which don't coincide with the known T. Vazhevski condition in the theory of differential inegualities and dose to the B-monotone condition of Yu. Pokorny have been proved.

Доведені теореми про системи двосторонніх диференціальних нерівностей зі звичайними похідними за припущень, що не збігаються з відомою в теорії диференціальних нерівностей умовою Т. Важевського і близькі до умови B-монотонності Ю.В. Покорного.