Здесь $n \geq 2$ определяет характер нелинейного взаимодействия.

Исследование проводились методом функций Грина, с помощью которого можно получить спектр элементарных возбуждений системы и сделать вывод о термодинамической устойчивости системы.

Результаты и их обсуждение. Результаты исследования показали, что в случае а) линейного взаимодействия не происходит потери термодинамической устойчивости системы. Действительно, используя преобразования Боголюбова, можно привести гамильтониан системы $H = H_0 + H_1 + H_2$ к диагональному виду. В такой системе потеря устойчивости невозможна. В случае нелинейного взаимодействия b) гамильтониан системы с помощью преобразования Боголюбова нельзя привести к диагональному виду. Анализ спектра элементарных возбуждений системы показывает, что в системе появляется неустойчивое колебание (мягкая мода). Система с понижением температуры может перейти в состояние с более низкой симметрией.

Заключение. В системах частиц со спектром осцилляторного типа, взаимодействие которых с бозонным полем нелинейно, при понижении температуры происходит потеря термодинамической устойчивости и переход системы в низкосимметричное состояние.

Список литературы

1. Буйнов, Н.С. Роль нелинейности в сверизлучательном фазовом переходе системы квантовых осцилляторов / Н.С. Буйнов, Нагибаров В.Р. Соловаров Н.К. // VIII Всесоюзная конференция по когерентной и нелинейной оптике: тезисы докладов, Тбилиси, 25-28 мая 1976 г. в 2 т. / Мецниереба – Тбилиси, 1976. – Т. 2. – С.129.
2. Буйнов, Н.С. Спектр элементарных возбуждений в системе осцилляторного типа. / Н.С. Буйнов, В.С. Иванов В.С. // Веснік ВДУ. – 2004. – №2 (32). – С. 128–130.

ПОСТРОЕНИЕ АППРОКСИМИРУЮЩЕЙ ПРЯМОЙ С НЕДИФФЕРЕНЦИРУЕМЫМ КРИТЕРИЕМ АППРОКСИМАЦИИ

В.В. Силивончик

Витебск, ВГТУ

Задача может рассматриваться как частный случай задачи минимизации выпуклого функционала на конечном множестве, содержащем большое число точек. В работе указывается метод последовательного улучшения оптимизируемых параметров. Пусть на плоскости дана последовательность точек $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$, причём $x_i \neq x_j$ при $i \neq j$. Требуется найти прямую, определяемую уравнением $y = ax + b$, для которой функция $\Phi(a,b) = \sum_1^n | ax_i + b - y_i |$ принимает минимальное значение.

Материал и методы. Для минимизации выпуклого функционала используется понятие субградиента и субдифференциала. Ищутся значения параметров, при которых субдифференциал содержит нулевой субградиент. При отсутствии нулевого субградиента методами дифференциального исчисления обосновывается переход, уменьшающий значение функционала. В качестве оптимизируемого функционала рассматривается выпуклая функция $\Phi(a,b)=\sum_{1}^{n}|ax_i+b-y_i|$.

Результаты и их обсуждение. Укажем некоторые предварительные факты. Субдифференциал функции $\Phi(a,b)$ имеет вид

$$\partial_*\Phi(a,b)=\left(\sum_{1}^{n}\frac{ax_i+b-y_i}{|ax_i+b-y_i|}x_i;\sum_{1}^{n}\frac{ax_i+b-y_i}{|ax_i+b-y_i|}\right).$$

Тогда критерий минимальности $(0;0)\in\partial_*\Phi(a,b)$ даёт систему уравнений

$$\sum_{1}^{n}c_ix_i=0,\ \sum_{1}^{n}c_i=0, \tag{1}$$

$$c_i=\frac{ax_i+b-y_i}{|ax_i+b-y_i|}=\begin{cases}1,\ \textit{при}\ ax_i+b-y_i>0\\ -1\ \textit{при}\ ax_i+b-y_i<0\\ \textit{некоторое число из отрезка}\ [-1;1]\ \textit{при}\ ax_i+b-y_i=0\end{cases}.$$

Неравенство $c_i>0$, означает, что прямая проходит выше точки $(x_i;y_i)$, $c_i<0$, – ниже. Если прямая проходит через точку, то c_i может принимать любое значение на отрезке $[-1;1]$. Функция $\Phi(a,b)$ принимает вид

$$\Phi(a,b)=\sum_{1}^{n}|ax_i+b-y_i|=\sum_{1}^{n}c_i(ax_i+b-y_i).$$

Опишем простейшие случаи. Пусть прямая $y=ax+b$ удовлетворяет системе уравнений (1).

1. Прямая не проходит через точки $(x_1,y_1),...,(x_n,y_n)$. Тогда её можно сдвигать и поворачивать до соприкосновения с первой попавшейся точкой с сохранением равенств (1). Имеем множество оптимальных прямых.

2. Прямая проходит ровно через одну точку (x_1,y_1). Из второго уравнения (1) получаем, что c_1 – целое. Если $c_1=1$ прямую можно поворачивать и сдвигать вверх с сохранением равенств (1); если $c_1=-1$ прямую можно поворачивать и сдвигать вниз; если $c_1=0$ прямую можно поворачивать. Имеем множество оптимальных прямых.

3. Прямая проходит ровно через две точки $(x_1,y_1),(x_2;y_2)$. Пусть $x_2>x_1$. Обозначим: $A_1=c_1, A_2=c_2$ Запишем и решим систему (1):

$$\begin{cases}A_1x_1+A_2x_2=-\sum_{3}^{n}c_ix_i\\ A_1+A_2=-\sum_{3}^{n}c_i\end{cases};\quad A_1=\frac{\sum_{3}^{n}c_i(x_i-x_2)}{x_2-x_1},\quad A_2=\frac{-\sum_{3}^{n}c_i(x_i-x_1)}{x_2-x_1}. \tag{2}$$

При целых значениях A_1,A_2 прямую можно двигать тем или иным образом с сохранением оптимальности. Если A_1,A_2 – дробные ($A_1,A_2\in(-1;1)$), то имеем единственную оптимальную прямую.

ПОСТРОЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ ПРЯМОЙ.

Предложение 1. Пусть прямая $y=ax+b$ проходит ровно через одну точку

(x_1, y_1) и $A_1 = -\sum_2^n c_i$ Тогда, если $A_1 > 1$, то прямую можно двигать вверх, а если $A_1 < -1$, – вниз с уменьшением значения функции $\Phi(a,b)$. Если $A_1 x_1 + \sum_2^n c_i x_i < 0$, то прямую можно поворачивать вокруг точки (x_1, y_1) против часовой стрелки, а если $A_1 x_1 + \sum_2^n c_i x_i > 0$, по часовой стрелке – с уменьшением значения функции $\Phi(a,b)$.

Предложение 2.. Пусть прямая $y = ax + b$ проходит ровно через две точки $(x_1, y_1), (x_2; y_2)$ ($x_2 > x_1$), и A_1, A_2 – те же, что и в формулах (2). Предположим, что $|A_2| > 1$. Тогда вращением прямой вокруг точки (x_1, y_1) можно получить уменьшение функции $\Phi(a;b)$. При $A_2 > 1$ вращать следует в сторону роста параметра a, при $A_2 < -1$ – в сторону убывания a.

Предложение 3. Пусть прямая $y = ax + b$ проходит ровно через две точки $(x_1, y_1), (x_2; y_2)$ ($x_2 > x_1$), и A_1, A_2 – те же, что и в формулах (2). Предположим, что $|A_1| > 1$. Тогда вращением прямой вокруг точки (x_2, y_2) можно получить уменьшение функции $\Phi(a;b)$. При $A_1 > 1$ вращать следует в сторону убывания параметра a, при $A_1 < -1$ – в сторону роста a.

Замечание. Предложения 2 и 3 описывают механизм улучшения текущей неоптимальной прямой, если она проходит через две точки.

Теперь рассмотрим прямую, проходящую через три и более точки. Пусть прямая $y = ax + b$ проходит через точки $(x_1, y_1), (x_2; y_2), ..., (x_k; y_k)$ $(k > 2)$ и не проходит через остальные. Оставим в рассмотрении две из них и запишем уравнения, аналогичные (2).

Предложение 4. Пусть прямая $y = ax + b$ проходит только через точки $(x_1, y_1), (x_2; y_2), ..., (x_k; y_k)$ и A_1, A_2 – получены по формулам (2). Если справедливы неравенства $|A_1|, |A_2| \le 1$, то данная прямая является оптимальной прямой.

При справедливости условий предложения 4 появляется возможность сделать заключение об оптимальности, учитывая только две точки. Как правило неравенства $|A_1|, |A_2| \le 1$ не выполняются, но это не означает неоптимальность прямой. Анализ этой ситуации даётся ниже.

Предложение 5. Пусть прямая $y = a_0 x + b_0$ проходит только через точки $(x_1, y_1), (x_2; y_2), ..., (x_k; y_k)$ и справедливы неравенства

$$-\sum_{i=1}^{k} |x_j - x_i| < \sum_{k+1}^{n} c_i x_i - \sum_{k+1}^{n} c_i x_j < \sum_{i=1}^{k} |x_j - x_i| \ (1 \le j \le k). \qquad (3)$$

Тогда данная прямая является оптимальной.

Нарушение какого-нибудь из условий (3). даёт неоптимальность прямой. Это нарушение указывает на возможный поворот прямой с уменьшением значения функции $\Phi(a;b)$, т.е. указывает способ её улучшения. Например, условие

$-\sum_{i=1}^{k}\Delta_{i2} > \sum_{k+1}^{n}c_i x_i - \sum_{k+1}^{n}c_i x_2$ означает, что при повороте прямой против часовой стрелки вокруг точки $(x_2; y_2)$ значение функции будет уменьшаться. Если среди неравенств (3) имеются нестрогие, то функция $\Phi(a;b)$ убывать не может, но при некоторых движениях получаем сохранение её оптимального значения. Получаем множественность оптимальных прямых.

Список литературы

1. Иоффе, А.Д. Теория экстремальных задач / А.Д. Иоффе, В.М. Тихомиров. – М.: Наука, 1976. – 480с.

МЕТОДЫ ЗОНДОВОЙ МИКРОСКОПИИ В ИССЛЕДОВАНИИ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ ТГС - ТГС:CR

А.Л. Толстихина[1], В.Н. Шут[2, 3], С.Е. Мозжаров[3], И.Ф. Кашевич[2]
[1]Москва, Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН
[2]Витебск, ВГУ имени П.М. Машерова
[3]Витебск, ИТА НАН Беларуси

В последние годы для создания сегнетоэлектрических материалов с заданными свойствами активно развивается новое направление – «доменная инженерия». Этот подход направлен на поиск способов управления параметрами доменной структуры, от конфигурации и состояния которой зависят многие практически важные свойства сегнетоэлектрических кристаллов. Большие успехи здесь достигнуты в получении высокотемпературных кристаллов-сегнетоэлектриков группы ниобата и танталата лития с периодической доменной структурой (ПДС). Один из способов создания такой конфигурации доменов заключается в том, что доменные стенки формируются на участках кристаллов, где происходит значительное изменение концентрации примеси, т.е. имеет место модуляция доменной структуры ростовыми примесными слоями.

С целью изучения возможности формирования ПДС в сегнетоэлектриках, выращиваемых из растворов, нами проводятся работы, связанные с получением и исследованием кристаллов триглицинсульфата (ТГС) со специально создаваемыми периодическими примесными слоями.

Материал и методы. Кристаллы ТГС - ТГС:Cr получали путем периодического доращивания кристалла в растворах разного состава (в чистом и содержащем примесь ионов хрома (Cr^{3+})). Период структуры можно изменять, меняя температуру насыщения исходных растворов или время наращивания слоев. Кроме того, формирование периодической примесной структуры зависит от пирамиды роста (поскольку различные грани имеют разную скорость роста).

Для выяснения вопроса о реализации ПДС в областях со слоистой примесной структурой требуются надежные методы выявления и идентификации доменов и их границ. Поэтому при разработке методологии наблюдения и исследования доменной структуры были изучены и опробованы различные способы выявления доменной структуры полученных кристаллов, в частности, избирательное травление, метод порошков (или декорирования), метод нематических жидких кристаллов (НЖК), с помощью растрового электронного микроскопа. Каждый из этих методов имеет как определенные преимущества, так и некоторые недостатки. Наиболее информативным методом для изучения доменной структуры ТГС является метод, основанный на применении нематических жидких кристаллов