



Національна академія наук України  
Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова

**ХІМІЧ О.М.**

**ПЕТРИК М.Р.**

**МИХАЛИК Д.М.**

**БОЙКО І.В.**

**ПОПОВ О.В.**

**СИДОРУК В.А.**

# **МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ НА ОСНОВІ ВИСОКОПРОДУКТИВНИХ ОБЧИСЛЕНЬ**

(нейро- та нанопористі кіберфізичні системи із зворотніми зв'язками, моделі з даними розрідженої структури, паралельні обчислення)

**Київ 2019**

**The National Academy of Sciences of Ukraine  
V.M. Glushkov Institute of Cybernetics  
Termopil Ivan Puluj National Technical University**

**KHIMICH O.M.**

**PETRYK M.R.**

**MYKHALYK D.M.**

**BOYKO I.V.**

**POPOV O.V.**

**SYDORUK V.A.**

**METHODS OF MATHEMATICAL MODELING AND  
IDENTIFICATION OF COMPLEX PROCESSES AND  
SYSTEMS ON THE BASIS OF HIGH-PERFORMANCE  
CALCULATIONS**

(neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse  
structure data, parallel computations)

**Kyiv 2019**

**УДК 519.6 : 541.18**

**ББК 519.4**

В даній монографії висвітлені нові підходи до розробки високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій моделювання та ідентифікації на основі паралельних обчислень складних кіберфізичних систем (нейро- та нанопористих систем) за наявності великої кількості зворотних зв'язків (feedback) та взаємодій, що контролюються значною кількістю розподілених і мережевих обчислювальних елементів. Проектування розглядуваних кіберфізичних систем ґрунтується на нових наукоємних технологіях опису об'єктів, нових обчислювальних рішеннях з урахуванням архітектури комп'ютерних систем та програмного забезпечення (паралельні алгоритми багатопараметричної ідентифікації).

Для наукових працівників, фахівців у галузі прикладної математики, математичного моделювання, високопродуктивних паралельних обчислень та програмної інженерії, викладачів вищих навчальних закладів, аспірантів, інженерів та студентів.

#### **Рецензенти**

доктор фізико-математичних наук, професор, член-кореспондент НАНУ

Ляшко С.І.

доктор фізико-математичних наук, ст. наук. співр. Галба Є.Ф.

Друкується згідно рішень Вченої ради Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України (протокол № 12 від 26.12.2019 р.) та Науково-видавничої ради Національної академії наук України (№ 33/393-1 від 27.12.2019 р.).

**ISBN 978-966-02-9188-1**

© О.М. Хіміч, М.Р. Петрик, Д.М. Михалик,  
І.В. Бойко, О.В. Попов, В.А. Сидорук 2019

## ЗМІСТ

Передмова .....	5
Вступ.....	11
Розділ 1. Високопродуктивні методи діагностування та ідентифікації параметрів аномальних неврологічних станів, спричинених когнітивними feedback-впливами кори головного мозку.....	15
1.1. Проблематика аномальних неврологічних станів людини .....	15
1.2. Комплексна методика та засоби аналізу для діагностики неврологічних станів Т-об'єктів на основі гібридної моделі АНР.....	17
1.3. Гібридна математична модель аналізу АНР Т-об'єкта на основі feedback-зв'язків і впливів нейронних вузлів КГР .....	20
1.4. Ідентифікація амплітудних компонент АНР. Обернена неоднорідна крайова задача з урахуванням когнітивних feedback-впливів нейро-вузлів КГМ .....	26
1.5. Початково-крайові задачі, що супроводжують алгоритми ідентифікації параметрів в АНР.....	29
1.6. Постановка і методика розв'язання спряженої крайової задачі АНР.....	30
1.7. Постановка і методика розв'язання спряжених початково-крайових задач функціональної ідентифікації АНР.....	31
1.8. Формули для компонентів градієнтів та регуляризаційні вирази.....	32
Розділ 2. Високопродуктивні методи моделювання та ідентифікації feedback-впливів компететивної адсорбції поглинутих газових забруднень атмосфери на мікро- і макрорівнях у нанопористих системах.....	36
2.1. Аналіз стану досліджень .....	36
2.2. Експеримент.....	38
2.3. Результати експериментів: Криві компететивної адсорбції газоподібних бензолу та гексану .....	39
2.4. Математична модель компететивної адсорбції та дифузії в нанопористих системах.....	40
2.5 Числове моделювання та аналіз: коефіцієнти компететивної дифузії. Профілі концентрації в між- та внутрішньокристалітних просторах .....	47
2.6. Ітераційний градієнтний метод ідентифікації коефіцієнтів компететивної дифузії.....	51
2.7. Схема лінеаризації нелінійної моделі компететивної адсорбції. Система лінеаризованих задач та побудова розв'язків.....	55

Розділ 3. Високопродуктивні обчислювальні методи і технології моделювання нанопористих систем зі зворотніми зв'язками для адсорбційного очищення газів.....	61
3.1. Нелінійна математична модель неізотермічних адсорбції та десорбції на основі узагальненого рівняння адсорбційної рівноваги Ленгмюра .....	62
3.2. Методика побудови аналітичних розв'язків системи неоднорідних крайових задач адсорбції/десорбції.....	66
3.3 Комп'ютерне моделювання. Аналіз розподілів концентрації адсорбтиву в газовій фазі і нанопорах цеоліту та температур.....	71
Розділ 4. Високопродуктивні алгоритми розв'язування систем нелінійних рівнянь на суперкомп'ютерах з паралельною організацією обчислень .....	76
4.1. Багаторівнева модель паралельних обчислень.....	77
4.2. Паралельні алгоритми розв'язування СНР з розрідженою структурою даних .....	81
4.3. Паралельні алгоритми розв'язування систем лінійних рівнянь з розрідженою матрицею .....	83
4.4. Експериментальне дослідження паралельних алгоритмів. ....	117
Розділ 5. Методи інтегральних перетворень для побудови гібридних моделей АНР-рухів .....	122
5.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є із спектральним параметром для однорідних областей.....	122
5.2. Скінченні гібридні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених неоднорідних n-складових середовищ .....	132
5.3. Інтегральне перетворення Фур'є для напівобмежених неоднорідних n - складових середовищ .....	151
Висновки .....	166
Список використаних джерел .....	169

## ПЕРЕДМОВА

В даній монографії висвітлені нові підходи до розробки високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій моделювання та ідентифікації на основі паралельних обчислень складних кіберфізичних систем (нейро-, біо- та нанопористих систем) за наявності великої кількості зворотних зв'язків (feedback) та взаємодій, що контролюються значною кількістю розподілених і мережевих обчислювальних елементів. Не зважаючи на різну природу досліджуваних кіберфізичних систем, їх поведінка та стан окремих елементів визначається множиною розподілених feedback-впливів як когнітивного характеру (вплив певних ділянок нейронних вузлів кори головного мозку (КГР) на поведінку виконавчого органу, наприклад, кінцівки правої руки та ін.) так і фізичного характеру (концентраційні впливи адсорбованих компонент забруднень та наноджерел на умови динамічної рівноваги в певному шарі нанопористої системи) та інших взаємодій. Пропонована методологія відповідає низці пріоритетних наукових напрямів європейських програм («Горизонт 2020», РНС «DNIPRO»), пов'язаних з новітніми технологіями комп'ютерингу та інженерними методами для кіберфізичних систем систем (“Computing technologies and engineering methods for cyber-physical systems of systems (CPSS)”). Проектування розглядуваних CPSS ґрунтується на нових наукоємних технологіях опису об'єктів, нових обчислювальних рішеннях з урахуванням архітектури комп'ютерних систем та програмного забезпечення (паралельні алгоритми багатопараметричної ідентифікації).

Основною вирішуваною проблемою монографії є створення на основі паралельних обчислень високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій багатопараметричної ідентифікації складних кіберфізичних систем (нейро-біо-наномедичних та нанопористих фізичних систем) з feedback-зв'язками та взаємодіями, у тому числі когнітивними, для нейро-біосистем для визначення параметрів поведінки та стану окремих виконавчих елементів систем та оптимальних параметрів цих впливів і внутрішніх характеристик системи для отримання прогнозованої поведінки її виконавчих елементів. В медичних

застосуваннях згідно вказаних європрограм особлива увага приділяється новим цифровим системам діагностики і лікування та наномедицині. В контексті цього, пропоновані методики проектування наномедичних нейро-біо-CPSS орієнтовані на визначення параметрів аномальних рухів пацієнтів з тремор-ознаками (Т-об'єктів), спричинених негативними впливами певної множини нейронних вузлів КГР. Ідентифікація параметрів цих впливів окреслює шляхи вирішення проблеми. Другий тип розроблюваних інформаційних систем - нанопористі CPSS мають відношення до вирішення ще однієї світової проблеми – глобального потепління та реалізації стратегії безпечної енергетики шляхом впровадження розумних наносистем поглинання шкідливих викидів оксидів вуглецю та інших парникових газів об'єктів енергетики і промисловості та ін.

У першому розділі за результатами співробітництва з французькими лабораторіями Університету П'єра і Марії К'ЮРІ Сорбона Paris 6, Інституту головного і спинного мозку, Вищої школи промислових фізики і хімії Парижу ESPCI Paris авторами на основі розвинутих ними підходів до інтегральних перетворень та спектрального аналізу для неоднорідних середовищ запропоновано новий підхід до побудови гібридних моделей поширення хвильового сигналу, що описує стан і поведінку - аномальних неврологічних рухів (АНР) певних частин тіла Т-об'єкта за рахунок когнітивного впливу визначеної групи нейронних вузлів (надалі нейро-об'єктів) КГР. Авторами також запропонована методика побудови адаптивної матриці (відклику), що визначає параметри станів від дії визначених нейро-об'єктів КГМ. Також запропоновані нові наукоємні моделі нанопористих CPSS, що враховують комплекс лімітуючих фізичних чинників та механізмів feedback-впливів і наноджерел в компетитивних наносорбційних процесах, що протікають в таких системах. Петриком М.Р., Хімічем О.М. сформульовані прямі та обернені задачі ідентифікації систем багатокomпонентного переносу в неоднорідних наносередовищах на основі розпаралелювання і покомпонентного оцінювання взаємовпливів з отриманням явних виразів градієнтів функціоналів-нев'язок для реалізації градієнтних методів ідентифікації внутрішніх параметрів системи, зовнішніх feedback-взаємодій та наноджерел.



Запропонована гібридна модель нейро-біосистеми, що описує на основі поширення хвильового сигналу стан і поведінку  $T$ -об'єктів, а саме поsegmentний опис 3D-елементів траєкторій аномальних неврологічних рухів досліджуваної частини (кінцівки руки) корпусу  $T$ -об'єкта з врахуванням матриці когнітивних впливів груп нейро-об'єктів КГР. На основі гібридних інтегральних перетворень (Фур'є, Бесселя, Гільберта) отримано швидкісний аналітичний розв'язок моделі у вигляді вектор-функції, що описує 3D-елементи траєкторій на кожному АНР-сегменті. Запропонована нова методика обчислення гібридної спектральної функції АНР, системи ортогональних базових функцій та спектральних значень, що складають основу запропонованого гібридного перетворення та забезпечують отримання інтегрального векторного розв'язку моделі.

Авторами розв'язані нові неklasичні задачі багатопараметричної ідентифікації feedback-систем (нейро-біо- та нанопористих CPSS), шляхом розвитку на основі теорії оптимального керування складними багатокomпонентними системами високопродуктивних градієнтних алгоритмів для мінімізації цільових функціоналів-нев'язки. На основі гібридних інтегральних перетворень побудовані нові швидкісні аналітичні розв'язки моделей (прямі і обернені задачі) у векторній формі, що описують 3D-елементи АНР-траєкторій та концентраційні розподіли поглинутих компонентів в залежності від feedback-впливів на макро- і мікрорівнях. На основі цих підходів отримуються сформульовані прямі і обернені задачі багатопараметричної ідентифікації досліджуваних feedback-систем шляхом розпаралелювання і покомпонентного оцінювання взаємовпливів з отриманням явних виразів градієнтів функціоналів-нев'язок для реалізації градієнтних методів ідентифікації параметрів системи та зворотних взаємодій на макро- і мікрорівнях. Побудовані високопродуктивні регуляризаційні алгоритми ідентифікації параметрів систем та зворотних взаємодій на макро і мікрорівнях, що ґрунтуються на виразах градієнтів функціоналів-нев'язки і допускають розпаралелювання обчислень з урахуванням суперкомп'ютерної архітектури обчислювальних систем.

Побудова високошвидкісних аналітичних розв'язків обох типів feedback-моделей ґрунтується на розвитку підходів розпаралелювання обчислень з використанням ефективних схем декомпозиції і лінеаризації та методів гібридних інтегральних перетворень Фур'є і операційного методу Гевісайда.

У другому та третьому розділах реалізований аналогічний підхід щодо використання для побудови нових наукоємних моделей і нанопористих CPSS з врахуванням комплексу лімітуючих фізичних чинників та механізмів зворотних впливів і наноджерел в розгалуженій мережі нанопор. Вибір моделі ґрунтується на врахуванні низки важливих feedback-впливів на мікро- і макрорівні, внутрішньокінетичних ефектів та фізичних постулатів (дисперсійні та електростатичні сили (Джона-Ленарда, Ван-Дер-Вальса), адсорбційна взаємодія між молекулами адсорбтиву і активними центрами адсорбції на поверхні розділу фаз (постулати Гібса, Ленгмюра) та ін., що визначають високий ступінь опису кінетики адсорбції і десорбції в нанопорах каталітичних середовищ. Процеси переносу в таких системах включають дві складові: перенос в макропорах міжчастинкового простору (interparticle space) і мікроперенос в нанопорах частинок сферичної форми (interparticle space) – внутрішньочастинковий простір. В пропонованій нами моделі, балансові рівняння в міжчастинковому просторі доповнені впливом наноградієнтів концентрацій, що виникають вздовж радіусів нанопористих частинок і на їх поверхнях, що визначаються рівнянням балансу всередині частинки. Побудовані високошвидкісні аналітичні розв'язки обох типів feedback-моделей, що ґрунтується на розвитку підходів розпаралелювання обчислень з використанням ефективних схем декомпозиції та лінеаризації, методів гібридних інтегральних перетворень Фур'є та операційного методу Гевісайда і перетворення Лапласа.

Окремі дослідження по розділах 1 і 3 та їх написання виконанні за участю аспірантів кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя Мудрика І.Я. (підрозділи 1.2, 1.3 ) та Петрик М.М. (підрозділи 3.2, 3.3).

З метою ефективної алгоритмічно-програмної реалізації запропоновані матричні процедури розпаралелювання обчислень та їх виконання на суперкомп'ютерних платформах і кластерах. Перевага запропонованого векторного підходу побудови розв'язків моделей досліджуваних класів CPSS-систем над традиційним полягає у можливості здійснювати паралельний запуск довільної кількості процесів ідентифікації різної кількості параметрів, скорочуючи на декілька порядків тривалість ідентифікаційних процедур, орієнтованих на суперкомп'ютерну архітектуру. Розроблене програмне забезпечення високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій ідентифікації та засобів моделювання на основі паралельних обчислень складних feedback-систем (нейро-біо- та нанопористих систем), що є вагомим кроком у розвитку і впровадженні в Україні цифрової нейродіагностики та дієвої реалізації стратегії безпечної енергетики на основі сучасних кіберфізичних систем, наукоємних технологій і штучного інтелекту. Проведено комплексне дослідження feedback-систем (нейро-біо- та нанопористих CPSS) на основі створення наукоємних гібридних моделей, що описують стани і поведінку описуваних ними біо- і фізичних процесів, з врахуванням матриць когнітивних і фізичних feedback-впливів та розроблення на цій основі високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій ідентифікації їх параметрів.

В четвертому розділі розроблено методи та алгоритми дослідження математичних моделей з наближеними даними розрідженої структури на новітніх високопродуктивних комп'ютерах з паралельною організацією обчислень різної архітектури. Створено нову методологію дослідження математичних моделей з наближеними даними розрідженої структури на новітніх високопродуктивних паралельних і розподілених комп'ютерних системах з використанням багаторівневого паралелізму.

Розроблено підхід для розв'язування на суперкомп'ютерах нелінійних задач, які виникають при математичному моделюванні міцності і стійкості конструкцій, зокрема при моделюванні життєвого циклу відповідальних зварних конструкцій об'єктів енергетики. Розроблено та досліджено блочні та

блочно-циклічні алгоритми паралельних обчислень розв'язування на суперкомп'ютерах задач лінійної алгебри з розрідженими матрицями на основі структурної регуляризації та декомпозиції даних розрідженої структури. Задачі лінійної алгебри (системи лінійних рівнянь та матричні задачі на власні значення) складають значну частину при математичному моделюванні.

Підвищення якості математичного моделювання безпосередньо пов'язано зі збільшенням продуктивності і ефективності використання сучасних паралельних обчислювальних систем. Ключовим моментом у вирішенні даних проблем є питання вибору, розробки та застосування методів автоматизації проектування паралельних програм для математичного моделювання, а також програмних засобів налаштування розроблених програм на різні платформи високопродуктивних обчислень, до яких належать мультиядерні та кластерні архітектури, Гріди, відео- графічні процесори, «хмарні платформи» та ін.

У п'ятому розділі викладені основи теорії методів гібридних інтегральних перетворень для багатокomпонентних областей та алгоритмічних схем їх застосування в задачах моделювання та аналізу АНР-рухів.

## ВСТУП

Використання новітніх наукоємних технологій штучного інтелекту, нових високопродуктивних обчислювальних рішень з урахуванням сучасних архітектур програмного забезпечення комп'ютерних систем (паралельні багатокрокові обчислення, нові алгоритми багатопараметричної ідентифікації) дозволяє забезпечити системний підхід до проектування наукоємних методів цифрової діагностики і моніторингу стану здоров'я, що потребує поступових змін в науково-інженерні методи, проектування та експлуатацію відповідних кіберфізичних систем систем (cyber-physical systems of systems (CPSS)) [1]. В контексті низки програм Європейського Союзу, зокрема «Horizon 2020» та «Horizon Europe» до критичних захворювань тисячоліття віднесені есенційний та аномальний неврологічні тремори, пов'язані з тремтінням кінцівок людини, швидке прогресування яких призводить до хвороб Альцгеймера, Паркінсона та ін., що спричиняють параліч нервової системи [2]. Своєчасна діагностика і лікування дозволить зберегти сотні тисяч життів. За даними ВОЗ цими захворюваннями на сьогоднішній день у світі страждає понад 100 млн. населення планети [1].

Другий тип розроблюваних інформаційних систем - нанопористі CPSS мають відношення до вирішення ще однієї світової проблеми – глобального потепління та реалізації стратегії безпечної енергетики шляхом впровадження розумних наносистем поглинання шкідливих викидів вуглецю об'єктами енергетики. Це пов'язано з розробленням наукоємних моделей для підвищення науково-технологічного рівня адсорбційних технологій поглинання та утилізації викидних газів об'єктів енергетики і транспорту, очищення довкілля від забруднень та зменшення впливу глобального потепління. За даними Міжнародної групи експертів з питань зміни клімату ООН зростання середньої температури повітря над суходолом за останні 100 років досягло критичної межі і становить  $0,74 \pm 0,18$  °C [6]. Найбільша частка глобального потепління спостерігається в останні 50 років, що спричинена, в першу чергу, викидами

відпрацьованих газів об'єктами теплової енергетики і транспорту, що викликають парниковий ефект. Найнебезпечнішими серед них є оксиди вуглецю ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ) та різні вуглеводневі сполуки. Оцінки, отримані за кліматичними моделями, прогнозують підвищення в XXI столітті середньої температури поверхні Землі на величину від 1,1 до 6,4 °C.

Дослідження пов'язані з feedback- нейро-біо-системами, що до аналізу стану та поведінки T-об'єктів під когнітивним впливом нейронних вузлів КГР проводились низкою зарубіжних та вітчизняних дослідників, таких як Д. Хубенберг, А. Легранд, М. Відає, Ж. Ванг, Е. Луїс, Р. Енаф та ін. [2-5]. Основна увага в них зосереджена вивченню параметрів відносно нормальних станів та поведінки (нормальні хвильові рухи певних частин тіла), для аналізу яких застосовувались класичні методи цифрової обробки на основі перетворення Фур'є та наближено оцінювались когнітивні зв'язки методами і програмними технологіями нейронних мереж [2-3]. Такий підхід не дає можливості аналізу аномальних станів та поведінки (анормальні хвильові рухи), що притаманні реальним T-об'єктам з високими ступенем тремору. Ще однією проблемою є те, що для аналізу в основному використовують одновимірні моделі та пристрої, що реєструють показники руху тільки по одній координаті [4, 5]. За рахунок цього має місце втрата від 40 до 80% інформації, що де-факто визначає низький рівень показників такого аналізу. З іншого боку, за рахунок використання класичних моделей цифрової обробки у свою чергу ще на 60-80% знижується якість цих досліджень для T-об'єктів з аномальними станами, оскільки ці методи відкидають в шуми, знову ж таки, від 60 до 80% важливих даних, які можуть давати відповідь на питання про реальні когнітивні механізми впливу на окремі сегменти АНР- кривих.

Аналогічна ситуація для нанопористих CPSS. На сьогодні існує низка досліджень, пов'язаних з системами адсорбції газів в нанопористих системах теоретичного та експериментального характерів, що проводились низкою дослідників - Андер Н., Бонд Т., Пуертолас В., Наваро, Гарсія Т., Мічута О., Мартинюк П. [6-8], Каргер Й., Рутвен Д. [9, 10], та ін. Загалом, проведені

дослідження через складність експериментальних методів і недостатність підходів моделювання обмежуються інтегральним рівнем адсорбції [7, 8], без урахування feedback-впливів на макро- і нанорівні, структури нанопор та параметрів транспортних властивостей компонентів всередині них [10]. Це в кінцевому результаті обмежує розуміння механізмів фізичних взаємовпливів елементів та нанопроцесів, звужує можливість їх моделювання, даючи досить наближене уявлення про загальну поведінку системи.

Пропонована гібридна модель нейро-біо-системи, що описує на основі поширення хвильового сигналу стан і поведінку T-об'єктів, а саме посементний опис 3D-елементів траєкторій аномальних неврологічних рухів досліджуваної частини (кінцівки руки) тіла T-об'єкта з врахуванням матриці когнітивних впливів груп нейро-об'єктів КГР. Елементи моделі інтегруються в систему шляхом використання відповідних інтерфейсних умов. На основі гібридних інтегральних перетворень (Фур'є, Бесселя) отримується швидкісний аналітичний розв'язок моделі у вигляді вектор-функції, що описує 3D-елементи траєкторій на кожному АНР-сегменті. З метою декомпозицій складних АНР-рухів на простіші елементи, кількість розбиттів може вибиратись довільною в залежності від складності АНР-зображення. На основі цього запропонована нова методика обчислення гібридної спектральної функції АНР, системи ортогональних базових функцій та спектральних значень, що складають основу запропонованого гібридного перетворення та забезпечують отримання інтегрального векторного розв'язку моделі. Основним елементом розв'язку є адаптивна матриця (відклику), що визначає параметри станів від дії визначених груп нейро-об'єктів КГР.

Аналогічний підхід використовується для побудови нових наукоємних моделей і нанопористих CPSS, що враховують комплекс лімітуючих фізичних чинників та механізмів зворотних впливів і наноджерел в розгалуженій мережі нанопор. Модель розвинута на основі біпористої моделі багатокомпонентного переносу в неоднорідному середовищі нанопористих частинок. Вхідний потік суміші дифундує в макропорах (міжчастинковий простір) середовища і в мікро-

і нанопорах частинок. Вибір моделі ґрунтується на врахуванні низки важливих feedback-впливів на мікро- і макрорівні, внутрішньокінетичних ефектів та фізичних постулатів (дисперсійні та електростатичні сили (Джона-Ленарда, Ван-Дер-Вальса) [9], адсорбційна взаємодія між молекулами адсорбтиву і активними центрами адсорбції на поверхні розділу фаз (Гібс, Ленгмюр) [10, 11] та ін., що визначають високий ступінь опису кінетики адсорбції і десорбції в нанопорах каталітичних середовищ. Основні гіпотези і припущення: в системі досягається стан динамічної рівноваги, що визначається відповідним концентраційним градієнтом; закон динамічної рівноваги описується узагальненою залежністю Ленгмюра; кінетичні коефіцієнти залежать від часу та просторових координат; розглядається взаємовплив температурних ефектів.

Побудова високошвидкісних аналітичних розв'язків обох типів feedback-моделей ґрунтується на розвитку підходів розпаралелювання обчислень з використаннями ефективних схем декомпозиції та лінеаризації, методів гібридних інтегральних перетворень Фур'є та операційного методу Гевісайда і перетворення Лапласа. На основі цих підходів отримуються сформульовані прямі і обернені задачі багатопараметричної ідентифікації досліджуваних feedback-систем на основі розпаралелювання і покомпонентного оцінювання взаємовпливів з отриманням явних виразів градієнтів функціоналів-нев'язок для реалізації градієнтних методів ідентифікації внутрішніх параметрів системи та зворотних взаємодій на макро- і мікрорівнях.



# **Розділ 1. Високопродуктивні методи діагностування та ідентифікації параметрів анормальних неврологічних станів, спричинених когнітивними feedback-впливами кори головного мозку**

## **1.1. Проблематика анормальних неврологічних станів людини**

Тремор - це серія небажаних, малих коливних рухів, що стосуються органу або частини тіла (пальці рук, повіки, очні яблука, органи мовлення та ін.), що виникають в результаті мимовільного скорочення скелетних м'язів, відповідальних за переміщення цих органів [2]. Підвищення амплітуди і зміна частоти і форми коливань щодо норми (частота і амплітуда фізіологічного тремору) служать ознаками порушення центральних і периферійних нейронних механізмів регуляції рухів. Аналіз цих параметрів важливий як для розуміння ролі дисфункції окремих зон нейронних вузлів кори головного мозку (КГР) в процесах керування рухами, так і для клінічних досліджень раннього виявлення, уточненої діагностики рухових порушень, вибору і корекції оптимальних методів дієвої лікарської терапії.

Проблема складності ідентифікації та оцінювання тремтіння кінцівок існує внаслідок недосконалості методів неврологічного діагностування, зокрема через [2]:

- низьку точність оцінювання ступеню тремору;
- відсутність однозначності в результатах оцінювання (суб'єктивна оцінка);
- неможливість аналізу отриманої інформації в розрізі багатьох характеристик, «вузький» погляд на отриману інформацію;
- відсутність методів, що враховують feedback-зв'язки і впливи нейронних вузлів КГР на динаміку тремору;
- складність та висока вартість впровадження новітніх високотехнологічних способів діагностування в профільних клініках.

Все це визначає необхідність реформування способів та підходів до питання діагностування тремору в реальних умовах.

До найпрогресивніших на сьогодні технологій діагностування можна віднести 3D-motion test [1], або запис рухів людини в просторі за допомогою високочутливих швидкісних камер. Суть її полягає в повному зчитуванні рухів більшості елементів і частин тіла людини з допомогою інфрачервоних міток та 3d-камер. В сучасних умовах, для реєстрації тремору широко використовують системи і методи, призначені для визначення високоамплітудного тремору, характерного для хвороби Паркінсона і есенціального тремору [2]. Так, відомий спосіб ідентифікації тремору на площині за допомогою розпізнавання рисунку спіралі Архімеда, який можна виконувати на перовому графічному планшеті [3]. Окремі дослідження, пов'язані з аналізом тремору та частково когнітивними feedback-впливами нейровузлів КГР на стан Т-об'єктів проводились низкою дослідників, таких як А. Легранд, М. Відає, Апартіз Е., Ванг Ж., Луїс Е. та ін. [2-5]. Основна увага в них зосереджена вивченню параметрів відносно нормальних станів та поведінки (нормальні хвильові рухи певних частин тіла), для аналізу яких застосовувались класичні методи цифрової обробки на основі інтегрального перетворення Фур'є. В [1-3] наближено оцінювались когнітивні feedback-зв'язки методами і програмними технологіями нейронних мереж.

Такий підхід не дає можливості аналізу аномальних неврологічних рухів та кількісної оцінки станів та поведінки, притаманних пацієнтам, окремі частини тіла яких мають виражені ознаки з високим ступенем тремору (Т-об'єкти). Ще однією проблемою є те, що для аналізу в основному використовують одновимірні моделі та пристрої, що реєструють показники руху тільки по одній координаті [4, 5]. За рахунок цього має місце втрата від 40 до 80% інформації, що де-факто визначає низький рівень показників такого аналізу. З іншого боку, за рахунок використання класичних моделей цифрової обробки у свою чергу ще на 60 до 80% знижується якість цих досліджень для Т-об'єктів з аномальними станами, оскільки ці методи відкидають в шуми, знову ж таки, від 60 до 80% важливих даних, які можуть давати відповідь на питання про реальні когнітивні механізми впливу на окремі сегменти АНР- кривих [1-3]. В [5] поданий порівняльний аналіз втрат інформації при діагностуванні тремору з

використанням тесту спіралі Архімеда пацієнтами з різним ступенем тремору (табл.1.1.):

Табл.1.1.

№ тесту	Тривалість виконання, с	Покази акселерометра пера при відриві, %	Ступінь тремору	Оцінка згідно шкали Fahn-Tolossa-Marin
1	37	5	низький	1.8
2	44	9	низький	2.5
3	65	24	суттєвий	6.8
4	57	37	суттєвий	6.9
5	47	49	середній	4.5

Ідентифікація параметрів, що визначають вказані вище feedback-зв'язки та впливи на природу АНР та розроблення моделей і засобів, що підвищують точність аналізу неврологічного стану Т-об'єктів, складає предмет цього розділу.

## **1.2. Комплексна методика та засоби аналізу для діагностики неврологічних станів Т-об'єктів на основі гібридної моделі АНР**

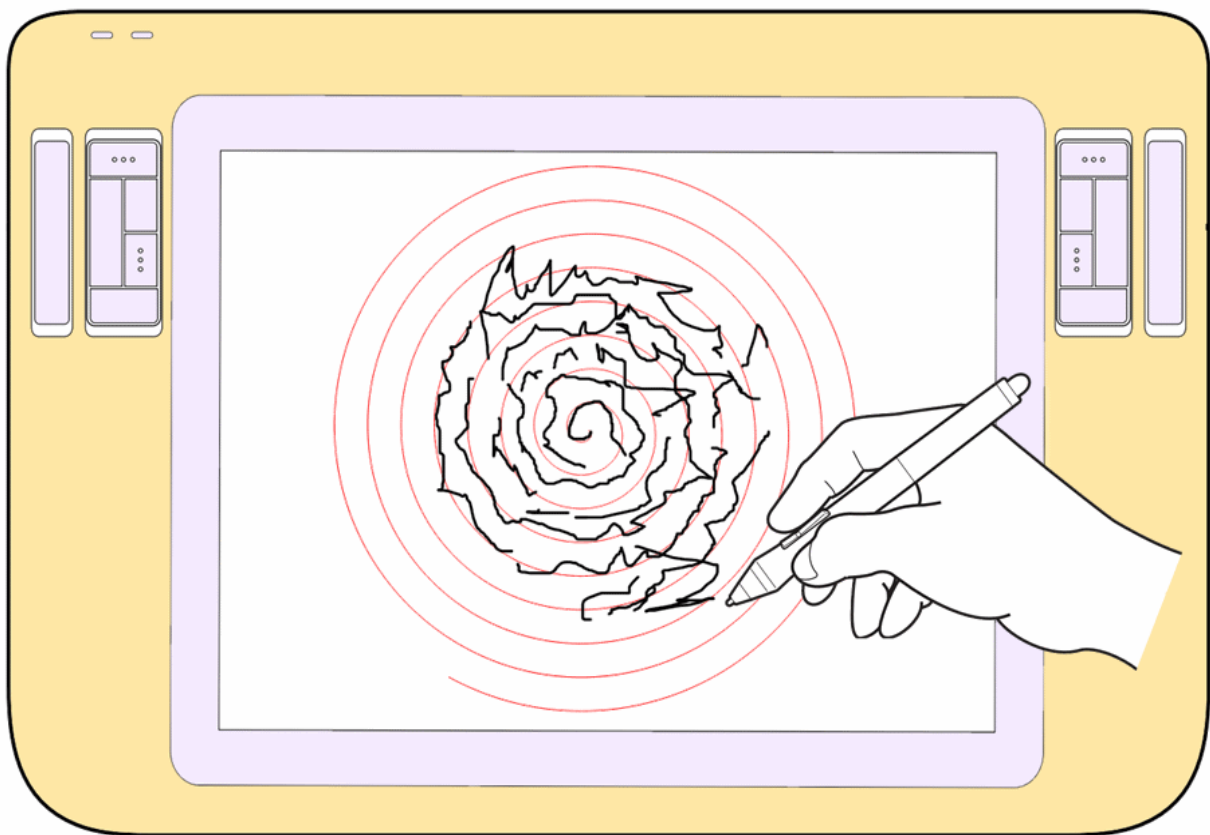
Пропонована авторами методика аналізу для діагностики неврологічних станів Т-об'єктів орієнтована передусім на визначення параметрів аномальних рухів пацієнтів з тремор-ознаками, спричинених негативними впливами певної множини нейронних вузлів КГР.

В основу методики покладена розроблена з використанням теорії поширення хвильового сигналу гібридна модель нейро-системи (вузли КГР та тремор-об'єкт), що описує стани і поведінку Т-об'єктів. Модель визначає поsegmentний опис 3D-елементів траєкторій АНР досліджуваного Т-об'єкту (кінцівки руки) з урахуванням матриці когнітивних впливів груп нейро-вузлів КГР на сегменти руху, елементи якої включають компоненти гібридної спектральної функції системи для усіх АНР-сегментів [12, 13]. З метою декомпозиції складних АНР-рухів на простіші елементи, кількість розбиттів може вибиратись довільною в залежності від складності АНР-зображення. Математична модель передбачає отримання кількісних характеристик тремору.

У даній методиці аналізу даних АНР-рухів Т-об'єкту надзвичайно важливим результатом є можливість отримати частотну характеристику, використовуючи гібридне інтегральне перетворення Фур'є та методи цифрової обробки сигналів на гібридних спектральних функціях та спектральних значень [12, 13].

### 1.2.1. Апаратні засоби аналізу АНР

В основу реалізації апаратного рішення нами покладено спосіб постійного безперервного визначення позиції електронного пера по відношенню до будь-якої контрольної координати [14]. Для виконання емпіричних досліджень використано сенсорний перовий планшет (дігітайзер Wacom Cintiq 12WX) з частотою дискретизації 133Гц та точністю  $\pm 0,25$  мм. Шаблон має вигляд спіралі Архімеда з декількома оборотами за або проти годинникової стрілки, з інтер-петлею 9 мм. Даний шаблон розташовується на екрані інтерактивного планшета, з можливістю виконання рисунку пацієнтом з допомогою електронного пера (рис. 1.1.).



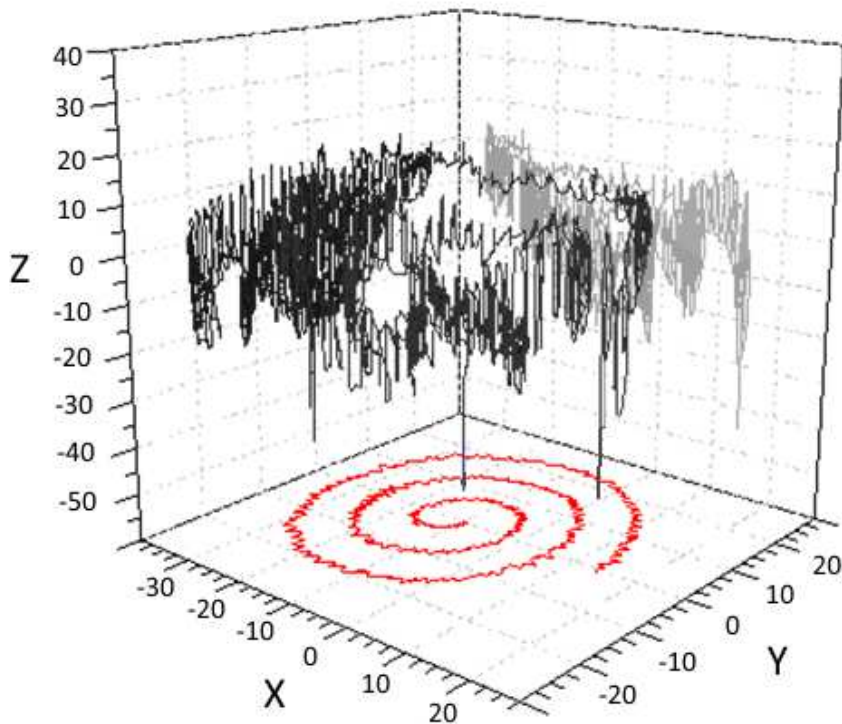
**Рисунок 1.1.** Спосіб застосування ПЗ для відтворення шаблону спіралі Архімеда на графічному планшеті Wacom Cintiq

Електронне перо використовується для ідентифікації рукописного вводу інформації (цифри, текстова інформація, шаблонні рисунки) або виконання запису та оцифрування довільних рухів кінцівки руки. Нами запропонований пристрій графічного цифрового пера з вбудованим 3D-мікроакселерометром для проведення діагностичного тесту. Мікроконтролер здійснює зчитування та обробку інформації з трьохосового сенсора прискорення (мікроакселерометра). Відповідно до запропонованих формул визначаються покази миттєвих координат положення акселерометра в просторі [13, 14]. У паралельному потоці відбувається отримання інформації про переміщення електронного пера на площині графічного планшета.

При виявленні нульового значення тиску пера на чутливій поверхні планшета (що вказує на відрив пера від поверхні), необхідна інформація про переміщення пера отримується із показів мікроакселерометра - визначаються миттєві координати положення MEMS [14] акселерометра в просторі, що забезпечує повноту збору даних про траєкторію АНР Т-об'єкта та їх достовірність.

Оцифроване значення позиції пера передається через WIFI-передавач на ПК. В такий спосіб в комплексі підвищується надійність системи ідентифікації АНР-рухів Т-об'єкта (шляхом взаємодії чутливого елемента планшета з електронним пером та вбудованим в нього MEMS акселерометра).

Дані про переміщення пера у вигляді 3D-моделі АНР Т-об'єкта формуються у графічному вікні (рис. 1.2) з можливістю забезпечення декомпозиції складних 3D-рухів на 3 проєкції та подальшого аналізу кожної з них і вибору найвизначальнішої щодо ідентифікації та комплексної оцінки параметрів АНР [14].



**Рисунок 1.2.** 3D-модель АНР Т-об'єкта на основі зчитаних з мікроакселерометра даних

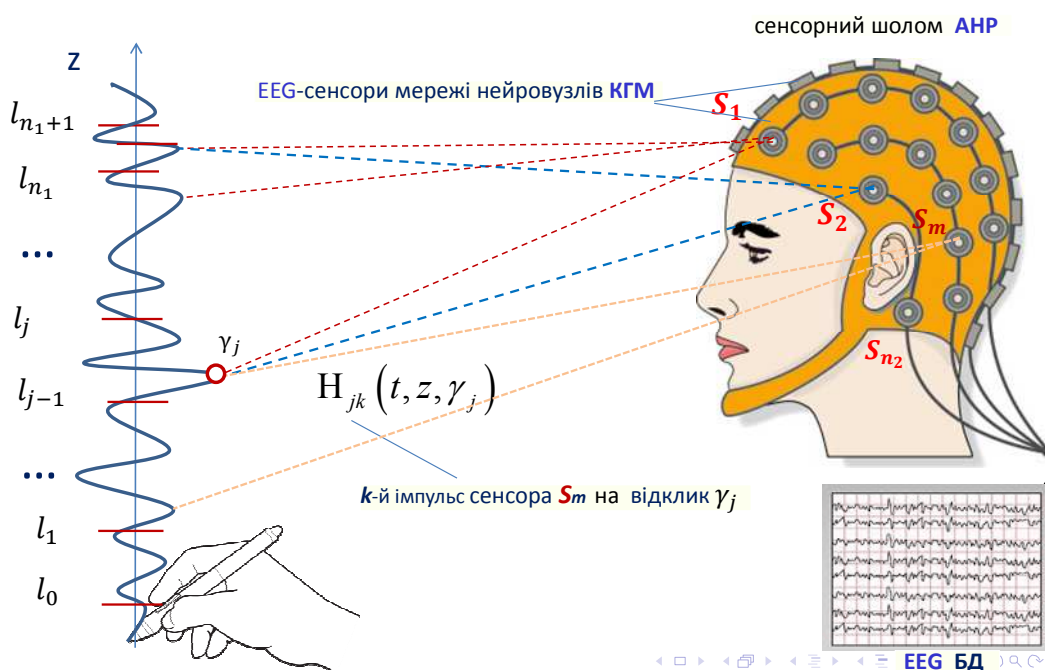
### **1.3. Гібридна математична модель аналізу АНР Т-об'єкта на основі feedback-зв'язків і впливів нейронних вузлів КГР**

#### **1.3.1. Постановка і методика розв'язання прямої неоднорідної крайової задачі аналізу АНР на основі когнітивних feedback-впливів**

**Основні фізичні припущення.** Згідно з програмою проведення експериментальних досліджень АНР Т-об'єктів для отримання якісної постановки задачі і побудови математичної моделі АНР використовуються дані однієї з визначальних проекцій руху у вигляді спіралі (згідно даних рис. 1.2.), яка легко трансформується у декартовий графік (відносно координатної вісі  $z$ , рис. 1.3). Дана траєкторія руху пов'язана когнітивними feedback-зв'язками з певною множиною нейронних вузлів КГМ, що посилають сигнали керування цим коливальним неврологічним рухам та визначають в цілому динаміку АНР досліджуваного Т-об'єкта (рис. 1.3). Для заміру сигналів впродовж усієї тривалості руху використовується система сенсорів у вигляді спеціального шолому, що контактує з відповідними нейронними вузлами КГМ пацієнта

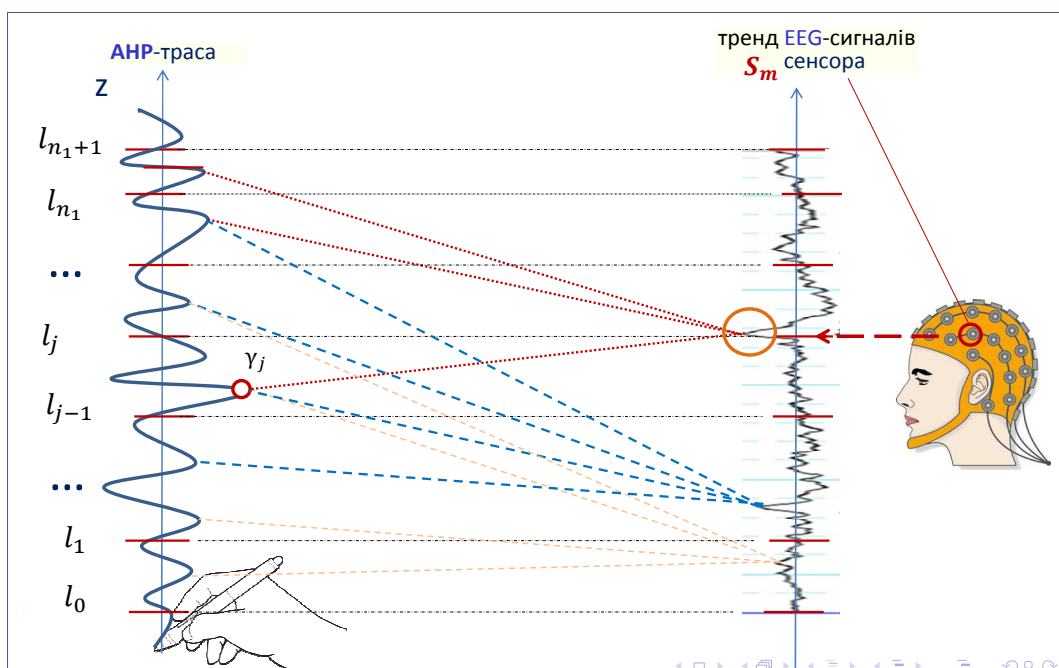
впродовж усієї тривалості руху електронного пера, що реєструє поведінку Т-об'єкта (кінцівку руки) (рис. 1.3). Тренди електроенцефалограм (EEG) сигналів, що реєструються сенсорами шолому, зберігаються у відповідній базі даних [13].

З метою декомпозиції складної АНР-траси для подальшого формулювання математичної моделі використовується схема її багатокomпонентної декомпозиції сегментів траєкторії руху (рис. 1.3).



**Рисунок 1.3.** Система взаємодії «нейро-вузли КГМ-Т-об'єкт». Компонентна декомпозиція складної АНР-траси на довільну скінченну кількість ( $n_1$ ) простих елементів руху

Відповідно до цього корелюються розподіли трендів EEG-сигналів нейровузлів, що здійснюють керування коливальним неврологічним рухом і в цілому визначають динаміку АНР для кожного  $j$ -го сегменту траси,  $j = \overline{1, n_1 + 1}$ , де  $n_1$ - кількість точок розбиття АНР-траси (рис. 1.4). Розбиття може задаватись автоматично довільним чином, з будь-якою скінченною кількістю сегментів, довжини яких також можуть бути різними в залежності від рівня деталізації ділянок руху та вибору прийнятних базисних функцій і побудови на їх основі прийнятних залежностей їх апроксимації [13, 14]. Одним із критеріїв визначення довжин елементів розбиття можуть бути амплітудні характеристики окремих трендів траси коливних АНР- рухів та ін. [12, 13].



**Рисунок 1.4.** Схематизація зв'язків когнітивних feedback-впливів EEG-сигналів окремо визначеного неврогічного вузла на окремі елементи АНР-траси Т-об'єкту

### 1.3.2. Математичне формулювання задачі.

На основі викладених фізичних припущень даної предметної області неврологічного аналізу, пряма неоднорідна початково-крайова задача визначення параметрів АНР Т-об'єкту може бути описана у вигляді системи рівнянь [12, 13]

$$\frac{\partial^2 u_j(t, z)}{\partial t^2} = b_j^2 \frac{\partial^2 u_j}{\partial z^2} + S_j^*(t, z), \quad z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n_1 + 1} \quad (1.1)$$

з однорідними початковими умовами

$$u_j(t, z)|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial u_j}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad j = \overline{1, n_1 + 1}, \quad (1.2)$$

однорідними крайовими умовами і системою інтерфейсних умов

$$\frac{\partial}{\partial z} u_1(t, z)_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} u_n(t, z)_{z=l} = 0, \quad (1.3)$$

$$\left[ u_j(t, z) - u_j(t, z) \right] \Big|_{z=l_j} = 0, \quad \left( b_j^2 \frac{\partial}{\partial z} u_k(t, z) - b_{j+1}^2 \frac{\partial}{\partial z} u_{j+1}(t, z) \right) \Big|_{z=l_j} = 0, \quad j = \overline{1, n_1} \quad (1.4)$$

в багатокомпонентній області  $D_n^+ = \left\{ (t, z) : t \in (0, T), z \in I_n = \bigcup_{j=1}^{n_1+1} (l_{j-1}, l_j); l_0 = 0, l_{n_1+1} \equiv l < \infty \right\}$ .



Тут (1.1) – система хвильових рівнянь, що описують АНР-траєкторії тремору на кожному  $j$ -му сегменті траєкторії  $j = \overline{1, n_1 + 1}$  в залежності від результуючої дії сукупності сигналів  $S_j^*(t, z)$ , що поступають від EEG-сенсорів для визначеної множини нейровузлів КГМ, що здійснюють керування поведінкою досліджуваного Т-об'єкту,  $b_j, j = \overline{1, n_1 + 1}$  - компоненти фазової швидкості поширення хвиль АНР, що є амплітудними характеристиками хвильового тремору;  $S_j^*(\tau, \xi) = \sum_{i=1}^{n_2} \alpha_{ji} S_i(\tau, \xi)$ ,  $[\alpha_{ji}]$ ,  $j = \overline{1, n_1}$ ,  $i = \overline{1, n_2}$  - адаптивна матриця, що визначає зв'язки і feedback-впливи конкретних нейровузлів КГМ на окремі малі сегменти АНР-траєкторії. Елемент матриці  $\alpha_{ji}$  є ваговим коефіцієнтом (від 0 до 1), що визначає інтегральний вплив  $i$ -го нейровузла  $S_i$  на  $j$ -й сегмент руху (визначаються методами машинного навчання на основі видобутку даних (data mining) [13]). Інтерфейсні умови (1.3), (1.4) забезпечують неперервність і цілісність розв'язку задачі для всієї багатоконпонентної області її визначення.

### 1.3.3. Побудова аналітичного розв'язку крайової задачі АНР

Для побудови аналітичного розв'язку прямої неоднорідної задачі (1.1) - (1.4) застосуємо гібридне інтегральне перетворення Фур'є (ГІПФ), визначене нами в [12]. Основу перетворення складають гібридні інтегральні оператори, записані у матричній формі:

- прямої дії

$$F_{n_1} [\dots] = \left[ \int_{l_0}^{l_1} \dots V_1(z, \beta_m) \sigma_1 dz \int_{l_1}^{l_2} \dots V_2(z, \beta_m) \sigma_2 dz \dots \int_{l_{n_1-1}}^{l_{n_1}} \dots V_{n_1}(z, \beta_m) \sigma_{n_1} dz \int_{l_{n_1}}^{l_{n_1+1}} \dots V_{n_1+1}(z, \beta_m) \sigma_{n_1+1} dz \right], \quad (1.5)$$

- оберненої дії

$$F_{n_1}^{-1} [\dots] = \left[ \begin{array}{c} \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_1(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|^2 \right)^{-1} \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_2(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|^2 \right)^{-1} \\ \dots \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_{n_1+1}(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|^2 \right)^{-1} \end{array} \right]. \quad (1.6)$$

Тут  $[V_k(z, \beta_m)]_{k=\overline{1, n_1+1}}$  - вектор гібридної спектральної функції ГПФ визначений

$$\begin{bmatrix} V_1(z, \beta_m) \\ \dots \\ V_k(z, \beta_m) \\ \dots \\ V_{n_1+1}(z, \beta_m) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \prod_{i=1}^{n_1} \xi_{i+1} \frac{\beta_m}{b_{i+1}} \left( \omega_0^2(\beta_m) \mathcal{G}_1^{11} \left( \frac{\beta_m}{b_1} z \right) - \omega_0^1(\beta_m) \mathcal{G}_1^{21} \left( \frac{\beta_m}{b_1} z \right) \right) \\ \dots \\ \prod_{i=k}^{n_1} \xi_{i+1} \frac{\beta_m}{b_{i+1}} \left( \omega_{k-1}^2(\beta_m) \mathcal{G}_k^{11} \left( \frac{\beta_m}{b_k} z \right) - \omega_{k-1}^1(\beta_m) \mathcal{G}_k^{21} \left( \frac{\beta_m}{b_k} z \right), k=\overline{2, n_1} \right) \\ \dots \\ \omega_{n_1}^2(\beta_m) \mathcal{G}_{n_1+1}^{11} \left( \frac{\beta_m}{b_{n_1+1}} z \right) - \omega_{n_1}^1(\beta_m) \mathcal{G}_{n_1+1}^{21} \left( \frac{\beta_m}{b_{n_1+1}} z \right) \end{bmatrix}. \quad (1.7)$$

$\{\beta_m\}_{m=0}^\infty$  - множина спектральних значень ГПФ, що є коренями трансцендентного рівняння

$$\omega_{n_1}^2(\beta) \mathcal{G}_{n_1+1}^{11} \left( \frac{\beta}{b_{n_1+1}} l_{n_1+1} \right) - \omega_{n_1}^1(\beta) \mathcal{G}_{n_1+1}^{21} \left( \frac{\beta}{b_{n_1+1}} l_{n_1+1} \right) = 0. \quad (1.8)$$

В [12] встановлено, що множина спектральних значень є монотонно-зростаючою послідовністю і збігається до точки  $+\infty$ .

На основі цього запропонована рекурентна методика обчислення компонентів гібридної спектральної функції АНР на основі вибору системи ортогональних базових функцій, що складає основу запропонованого гібридного перетворення та забезпечує отримання інтегрального векторного розв'язку моделі:

$$\begin{aligned} \omega_k^j(\beta) &= \omega_{k-1}^2(\beta) \psi_{1j}^k \left( \frac{\beta}{b_k} l_k, \frac{\beta}{b_{k+1}} l_k \right) - \omega_{k-1}^1(\beta) \psi_{2j}^k \left( \frac{\beta}{b_k} l_k, \frac{\beta}{b_{k+1}} l_k \right) \\ \psi_{ij}^k \left( \frac{\beta}{b_k} l_k, \frac{\beta}{b_{k+1}} l_k \right) &= \mathcal{G}_k^{i1} \left( \frac{\beta}{b_k} l_k \right) \mathcal{G}_k^{j2} \left( \frac{\beta}{b_{k+1}} l_k \right) - \mathcal{G}_k^{i2} \left( \frac{\beta}{b_k} l_k \right) \mathcal{G}_k^{j1} \left( \frac{\beta}{b_{k+1}} l_k \right), \quad i, j = \overline{1, 2}, \quad k = \overline{1, n_1} \\ \mathcal{G}_k^{11} \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right) &= \cos \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right), \quad \mathcal{G}_k^{21} \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right) = \sin \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right) \\ \mathcal{G}_k^{12} \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right) &= -\xi_s \frac{\beta}{b_s} \sin \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right), \quad \mathcal{G}_k^{22} \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right) = \xi_s \frac{\beta}{b_s} \cos \left( \frac{\beta}{b_s} l_k \right), \quad s \in \{k, k+1\} \\ \omega_0^1(\beta) &= -\mathcal{G}_0^{11} \left( \frac{\beta}{b_1} l_0 \right), \quad \omega_0^2(\beta) = -\mathcal{G}_0^{21} \left( \frac{\beta}{b_1} l_0 \right). \\ \sigma_j &= \frac{1}{b_j^2}, \quad j = \overline{1, n_1}. \end{aligned}$$

Запишемо систему рівнянь (1.1) та умови (1.2) крайової задачі (1.1) - (1.4) у матричній формі

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - b_1^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u_1(t, z) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - b_2^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u_2(t, z) \\ \dots \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - b_{n_1+1}^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) u_{n_1+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_1(t, z) \\ S_2(t, z) \\ \dots \\ S_{n_1+1}(t, z) \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n_1+1}(t, z) \end{bmatrix}_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n_1+1}(t, z) \end{bmatrix}_{t=0} = 0 \quad (1.9)$$

Застосувавши до задачі (1.9) інтегральний оператор ГПФ прямої дії  $F_{n_1}$  (1.5), де  $F_{n_1} [L_{n_1} [u(z)]] = -\beta_m^2 u_m$ ,  $L_{n_1} [\dots] = \sum_{j=1}^{n_1+1} b_j^2 \theta(z - l_{j-1}) \theta(l_j - z) \frac{d^2}{dz^2}$  - гібридний диференціальний оператор Фур'є,  $\theta$ - функція Гевісайда, одержуємо задачу Коші

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \beta_m^2\right) u_m(t) = S_m^*(t); \quad u_m(t)|_{t=0} = 0, \quad \frac{d}{dt} u_m(t)|_{t=0} = 0.$$

розв'язком якої є функція [12, 13]

$$u_m(t) = \int_0^t \frac{\sin \beta_m(t-\tau)}{\beta_m} S_m^*(\tau) d\tau \quad (1.10)$$

Застосувавши до (1.10) обернений інтегральний оператор ГПФ  $F_{n_1}^{-1}$  (1.6), після перетворень одержуємо єдиний розв'язок неоднорідної крайової задачі АНР (1.1) - (1.4)

$$u_j(t, z) = \sum_{k=1}^{n_1+1} \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} H_{jk}(t-\tau, z, \xi) S_k^*(\tau, \xi) \sigma_k d\xi d\tau, \quad j = \overline{1, n_1+1}. \quad (1.11)$$

Тут матриця впливу - відклику системи АНР на вплив  $k$ -го сегменту результуючої дії сигналів  $S_k^*$  визначеної множини нейро-вузлів КГМ на  $j$ -сегменті траси АНР

$$H_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin \beta_m t}{\beta_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|^2}; \quad j, k = \overline{1, n_1+1}. \quad (1.12)$$

## 1.4. Ідентифікація амплітудних компонент АНР. Обернена неоднорідна крайова задача з урахуванням когнітивних feedback-впливів нейровузлів КГМ

### 1.4.1. Вибір функціонала-нев'язки

Вважаємо, що амплітудні компоненти фазової швидкості поширення хвилі АНР  $b_k$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$  крайової задачі (1.1) - (1.4) є невідомими функціями від часу. Однак на поверхнях областей  $\gamma_k \subset \Omega_k$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$ , неоднорідного середовища відомі сліди розв'язків (траєкторій АНР)

$$u_k(t, z)|_{\gamma_k} = U_{l_k}(t, z)|_{\gamma_k}. \quad (1.13)$$

Тим самим отримана задача (1.1) - (1.4), (1.13), що полягає в знаходженні функцій  $b_k$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1} \in D$ , де  $D = \left\{ v(t, z) : v|_{\Omega_{kT}} \in C(\Omega_{kT}), v > 0, k = \overline{1, n_1 + 1} \right\}$ .

Функціонал-нев'язку, що визначає величину відхилення шуканого розв'язку від слідів розв'язку, отриманого емпіричним шляхом на поверхнях  $\gamma_k$ , запишемо у вигляді

$$J(b_k) = \frac{1}{2} \int_0^T \sum_{k=1}^{n_1+1} \|u_{s_k}(\tau, z, b_k) - U_k^*\|_{L_2(\gamma_k)}^2 \sigma_k d\tau \quad (1.14)$$

де  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)}^2 = \int_{\gamma_k} \varphi^2 d\gamma_k$  – квадрат норми. В даному випадку  $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)} = |\varphi(t, z)|_{z=\gamma_k}$ .

### 1.4.2. Задача функціональної ідентифікації амплітудних параметрів АНР

Задача (1.1) - (1.4) з урахуванням необхідності подання її розв'язку у формі реалізації процедури функціональної ідентифікації амплітудних компонентів фазової швидкості поширення хвилі АНР  $b_k^2$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$  як функції часу та умов, що відомі сліди розв'язку для кожного досить тонкого  $k$ -го сегмента,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$ , переформатовується у пряму крайову задачу (1.15) - (1.17) як систему – однорідних початково-крайових задач для послідовних тонких сегментів АНР:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_k(t, z) = b_k^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k + S_k^*(t, z) \quad (1.15)$$

з початковими умовами:

$$u_k(t, z)|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial u_k}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad k = \overline{1, n_1 + 1} \quad (1.16)$$

Крайові умови на кожному з тонких сегментів АНР по  $Z$ :

$$u_{k-1}(t, z)|_{z=l_{k-1}} = U_{l_{k-1}}, \quad u_k(t, z)|_{z=l_k} = U_{l_k}, \quad k = \overline{1, n_1 + 1} \quad (1.17)$$

**Вибір функціонала-нев'язки.** Вважаємо, що компоненти фазової швидкості поширення хвилі АНР  $b_k$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$  крайової задачі (1.15) - (1.17) є невідомими функціями від часу. При відомих значеннях положення пера  $u_k(t, z)$  в точках спостереження на сегментах АНР  $\gamma_k \subset \Omega_k$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$

$$u_k(t, z)|_{\gamma_k} = U_{l_k}(t, z)|_{\gamma_k} \quad (1.18)$$

початково-крайова задача (1.15) - (1.17) може бути розглянута для кожної точки  $z$  для кожного тонкого  $k_I$ -го сегмента траси АНР і полягатиме в знаходженні функцій  $b_k \in D$ , де  $D = \left\{ \nu(t, z) : \nu|_{\Omega_{k_I T}} \in C(\Omega_{k_I T}), \nu > 0, k = \overline{1, n_1 + 1} \right\}$ .

Функціонал-нев'язка відхилення розв'язку від його слідів на  $\gamma_{k_1} \in \Omega_{k_1}$ , згідно [13, 20] запишеться у вигляді

$$J_k(b_{kk}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left( \|u_k(t, z, b_k) - U_k^*\|^2 \right) dt \quad (1.19)$$

### 1.4.3. Методика розв'язання прямої крайової задачі ідентифікації

Побудова та математичне обґрунтування розв'язку задачі здійснюється шляхом використання скінченного інтегрального перетворення Фур'є [12, 13]. Застосувавши до задачі (1.15) - (1.17) інтегральні оператори [12]:

$$F[u_k(t, z)] = \int_{k-1}^{l_k} u_k(t, z) V_m(\beta_m, z) dz \equiv U_{km}(t),$$

$$F^{-1}[U_{km}(t)] = \sum_{m=0}^{\infty} U_{km}(t) \frac{V_m(\beta_m, z)}{\|V_m(\beta_m, z)\|^2} \equiv u_k(t, z), \quad (1.20)$$

$$F \left[ \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) \right] = -\beta_m^2 U_{km}(t) + \beta_m U_{l_{k-1}} \left[ 1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right] = -\beta_m^2 U_{km}(t) + \beta_m U_{l_{k-1}} - \beta_m (-1)^m U_{l_k},$$

$$V_m(\beta_m, z) = \sin \beta_m (z - l_{k-1}), \quad \beta_m = \frac{m\pi}{\Delta h}, \quad \|V_m\|^2 = \int_{l_{k-1}}^{l_k} [V_m(\beta_m, z)]^2 dz = \frac{\Delta l}{2},$$

одержуємо задачу Коші:

$$\frac{d^2}{dt^2} U_{km}(t, z) = -b_k^2 \beta_m^2 U_{km}(t) + b_k^2 \beta_m U_{l_{k-1}} \left[ 1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right] + S_{km}^*(t) \quad (1.21)$$

$$u_{km}(t, z)|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial u_{km}}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}. \quad (1.22)$$

Єдиний розв'язок задачі Коші (1.21), (1.22) має вигляд

$$U_{km}(t) = \int_0^t \frac{\sin b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \left[ S_{km}^*(\tau) + b_k^2 \beta_m (U_{l_{k-1}} - (-1)^m U_{l_k}) \right] d\tau \quad (1.23)$$

Перейшовши до оригіналів в (1.23), отримаємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (1.15) - (1.17) в класичній формі [12].

$$u_k(t, z) = \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathbb{H}_k^1(t - \tau, z, \xi) S_k^*(\tau, \xi) d\xi d\tau + \int_0^t \left( \mathbb{H}_k^{21}(t - \tau, z, l_{k-1}) U_{l_{k-1}} - \mathbb{H}_k^{22}(t - \tau, z, l_k) U_{l_k} \right) d\tau. \quad (1.24)$$

Тут компоненти векторів впливу мають вигляд

$$\mathbb{H}_k^1(t - \tau, z, \xi) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\sin b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \sin \beta_m (\xi - l_{k-1}) \sin \beta_m (z - l_{k-1})$$

$$\mathbb{H}_k^{21}(t, z, l_{k-1}) = \frac{2b_k}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \sin b_k \beta_m t \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \quad (1.25)$$

$$\mathbb{H}_k^{22}(t, z, l_k) = \frac{2b_k}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \sin(b_k \beta_m t) (-1)^m \sin \beta_m (z - l_{k-1}).$$

Розв'язок (1.24) задачі (1.15) - (1.17) після низки перетворень конвертуємо у форму зручну і ефективну для числових ітераційних розрахунків та для використання в процедурах ідентифікації параметрів. Після інтегрування та підстановки конкретних виразів функцій впливу та низки перетворень формули (1.25) зводяться до звичайних алгебраїчних виразів, зручних для процедури ідентифікації, що позбавляє необхідності використання ітерацій на цьому етапі регуляризаційного процесу ідентифікації, суттєво його інтенсифікуючи в цілому. Отже, після інтегрування отримуємо

$$\begin{aligned}
S_k^* \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} H_k(t-\tau, z, \xi) d\xi d\tau &= \frac{2}{\Delta h} S_k^* \sum_{m=\dot{a}}^{\infty} \frac{1-\cos(b_k \beta_m t)}{(b_k \beta_m)^2} \frac{1}{\beta_m} \left( (-1)^m - 1 \right) \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \\
U_{l_{k-1}} \int_0^t H_k^{21}(t, z, l_{k-1}) d\tau &= U_{l_{k-1}} \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1-\cos(b_k \beta_m t)}{\beta_m} \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \\
U_{l_k} \int_0^t H_k^{22}(t, z, l_{k-1}) d\tau &= U_{l_k} \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{1-\cos(b_k \beta_m t)}{\beta_m} \sin \beta_m (z - l_{k-1})
\end{aligned} \tag{1.26}$$

Після підстановки виразів (1.26) у (1.24) остаточно отримуємо

$$u_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1-\cos(b_k \beta_m t)}{\beta_m} \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \left( S_k^* \frac{1}{(b_k \beta_m)^2} \left( (-1)^m - 1 \right) + U_{l_{k-1}} \left( 1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right) \right). \tag{1.27}$$

## 1.5. Початково-крайові задачі, що супроводжують алгоритми ідентифікації параметрів в АНР

### 1.5.1. Початково-крайові задачі для приростів

З урахуванням приростів параметрів ідентифікації АНР  $b_k^{2n} + \Delta b_k^n$  на основі задачі (1.1) - (1.4) отримаємо відповідні прирости  $v_{s_k}$  для компонентів руху на сегментах траєкторії  $u_k + v_k$ . Нехтуючи членами другого порядку малості, для приростів  $v_k$  отримаємо наступну початково-крайову задачу [13]:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} v_k(t, z) = \frac{\partial}{\partial z} \left( b_k^n \frac{\partial}{\partial z} v_k \right) + \Delta b_k^n \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k, \quad z \in \Omega_{k_T}, \quad k = \overline{1, N_1 + 1} \tag{1.28}$$

з початковими умовами:

$$v_k(t, z)_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial t} v_k(t, z)_{t=0} = 0, \quad z \in \Omega_k, \quad k = \overline{1, N_1 + 1}, \tag{1.29}$$

крайовими та інтерфейсними умовами між сегментами АНР по  $z$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z} v_1(t, z)_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} v_{N_1+1}(t, z)_{z=l} = 0, \quad t \in (0, T), \\
\left[ v_k(t, z) - v_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0,
\end{aligned} \tag{1.30}$$

$$\left( b_k^{2n} \frac{\partial}{\partial z} v_k(t, z) + \Delta b_k^n \frac{\partial}{\partial z} u_k(t, z) - b_{k+1}^{2n} \frac{\partial}{\partial z} v_{k+1}(t, z) - \Delta b_{k+1}^n \frac{\partial}{\partial z} u_{k+1}(t, z) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n_1}$$

$$\left( (b_k^{2n} + \Delta b_k^n) \frac{\partial}{\partial z} (u_k(t, z) + v_k(t, z)) - (b_{k+1}^{2n} + \Delta b_{k+1}^n) \frac{\partial}{\partial z} (u_{k+1}(t, z) + v_{k+1}(t, z)) \right) \Big|_{z=l_k} - \left( b_k^{2n} \frac{\partial}{\partial z} u_k(t, z) - b_{k+1}^{2n} \frac{\partial}{\partial z} u_{k+1}(t, z) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n_1}$$

## 1.6. Постановка і методика розв'язання спряженої крайової задачі АНР

### 1.6.1. Постановка задачі в загальному вигляді

З врахуванням викладених вище міркувань у відповідності з вихідною прямою початково-крайовою задачею (1.1) - (1.4), згідно [13, 21] для кожного наближення  $\tilde{b}_k^n = b_k^{2n}$  розв'язку  $\tilde{b}_k = b_k^2$  вводимо до розгляду спряжену часово-крайову задачу

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi_k(t, z) + b_k^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_k(t, z) = (u_{k_k}^n - U_k^*) \Big|_{z=\gamma_k} \delta(z - \gamma_k), \quad k = \overline{1, n_1 + 1}. \quad (1.31)$$

Умови при  $t = T$

$$\phi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0; \quad (1.32)$$

Крайові та інтерфейсні умови між тонкими сегментами АНР по координаті  $z$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} \phi_1(t, z) \Big|_{z=0} = 0; \quad \frac{\partial}{\partial z} \phi_{n_1+1}(t, z) \Big|_{z=l} = 0, \quad t \in (0, T);$$

$$[\phi_k(t, z) - \phi_{k+1}(t, z)] \Big|_{z=l_m} = 0, \quad (1.33)$$

$$\left( b_k^2 \frac{\partial}{\partial z} \phi_k(t, z) - b_{k+1}^2 \frac{\partial}{\partial z} \phi_{k+1}(t, z) \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n_1}.$$

### Побудова аналітичного розв'язку спряженої часово-крайової задачі.

Для побудови аналітичного розв'язку спряженої неоднорідної часово-крайової задачі параметричної ідентифікації (1.31) - (1.33) застосовувався підхід, описаний вище для прямої задачі з використанням запровадженого інтегрального перетворення [12, 13]. В результаті отримуємо

$$\phi_{1_k}(t, z) = \int_t^T \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \bar{H}_{k, k_1}(t - \tau, z, \xi) (u_{k_1}^n - U_{k_1}^*)(\tau) \Big|_{z=\gamma_{k_1}} d\xi d\tau, \quad (1.34)$$

де  $\bar{H}_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\text{sh } \beta_m t}{\beta_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n_1 + 1}$  – спряжена матриця впливу

АНР.



## 1.7. Постановка і методика розв'язання спряжених початково-крайових задач функціональної ідентифікації АНР

З урахуванням викладених вище міркувань у відповідності з вихідною крайовою задачею функціональної ідентифікації (1.15) - (1.17), на основі [13, 21] та при умові, що відомі сліди розв'язку для кожного досить тонкого  $k$ -го сегмента траєкторії,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$ , можна переформатувати спряжену крайову задачу (1.31) - (1.33) в систему – спряжених однорідних часово-крайових задач функціональної ідентифікації для послідовних тонких сегментів АНР

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi_k(t, z) + b_k \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_k(t, z) = \left( u_{k_k}^n - U_k^* \right) \Big|_{z=\gamma_k} \delta(z - \gamma_k), \quad k = \overline{1, n_1 + 1} \quad (1.35)$$

умовами при  $t = T$

$$\phi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0 \quad (1.36)$$

та крайовими умовами першого роду для кожного наближення  $b_k^n$ , розв'язку:

$$\phi_k(t, z) \Big|_{z=l_{k-1}} = 0; \quad \phi_k(t, z) \Big|_{z=l_k} = 0. \quad (1.37)$$

**Аналітичний розв'язок спряженої часово-крайової задачі функціональної ідентифікації.** Застосувавши до задачі (1.35) - (1.37) скінченне інтегральне перетворення Фур'є, визначене інтегральними операторами (1.38) [12], одержуємо задачу Коші

$$\frac{d^2}{dt^2} \phi_{km}(t, z) - b_k^2 \beta_m^2 \phi_{km}(t) = F_{km}(t) \quad (1.38)$$

з початковими умовами

$$\phi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0, \quad \frac{\partial \phi_k}{\partial t} \Big|_{t=T} = 0, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}, \quad (1.39)$$

Знаходимо єдиний розв'язок задачі Коші (1.38), (1.39):

$$\phi_{km}(t) = \int_t^T \frac{\text{sh } b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} F_{km}(\tau) d\tau, \quad (1.40)$$

де  $\square_{km}(t) = \left( u_{k_k}^n - U_k^* \right) \Big|_{z=\gamma_k} \delta(z - \gamma_k)$ , або

$$\phi_{km}(t) = \int_\tau^T \frac{\text{sh } b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \left( u_{k_k}^n - U_k^* \right) \Big|_{z=\gamma_k} (\tau) \delta(z - \gamma_k)_m d\tau, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}.$$

Перейшовши до оригіналів в (1.40), отримаємо єдиний розв'язок спряженої крайової задачі (1.35) - (1.37) в класичній формі [13]

$$\phi_k(t, z) = \int_{t_{k-1}}^T \int_{l_{k-1}}^{l_k} \bar{H}_k(t - \tau, z, \xi) (u_{k_k}^n - U_k^*) \Big|_{z=\gamma_k} (\tau) \delta(\xi - \gamma_k) d\xi d\tau, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}. \quad (1.41)$$

Тут компоненти матриці впливу  $[\bar{H}_k(t, z, \xi)]$ ,  $k = \overline{1, n_1 + 1}$  мають вигляд

$$\bar{H}_k(t - \tau, z, \xi) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\text{sh } b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \sin \beta_m (\xi - l_{k-1}) \sin \beta_m (z - l_{k-1}). \quad (1.42)$$

Розв'язок (1.41) задачі (1.35) - (1.37) після низки перетворень, конвертуємо у формі зручній і ефективній для числових ітераційних розрахунків для використання в процедурах ідентифікації параметрів. Підставивши (1.42):

$$\phi_k(t, z) = \int_{t_{k-1}}^T \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\text{sh } b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \sin \beta_m (\xi - l_{k-1}) \sin \beta_m (z - l_{k-1}) (u_{k_k}^n - U_k^*) \Big|_{z=\gamma_k} (\tau) \delta(z - \gamma_k) d\xi d\tau, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}$$

після інтегрування остаточно отримуємо

$$\phi_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \text{ch}(b_k \beta_m (T - t))}{(b_k \beta_m)^2} \sin \beta_m \gamma_k \sin \beta_m (z - l_{k-1}) (U_k^* - u_{k_k}^n), \quad k = \overline{1, n_1 + 1}. \quad (1.43)$$

## 1.8. Формули для компонентів градієнтів та регуляризаційні вирази

**Формули для компонентів градієнтів.** Згідно [13, 21], отримуємо аналітичні вирази для компонентів градієнтів функціонала-нев'язки:

$$\nabla J_{\bar{b}_k} = \int_0^T \int_{l_{k-1}}^{l_k} \phi_k(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) dz dt. \quad (1.44)$$

Для задачі функціональної ідентифікації, згідно [13, 21], отримуємо наступні формули для компонентів градієнтів функціоналу нев'язки

$$\nabla J_{\bar{b}_k}(t) = \int_{l_{k-1}}^{l_k} \phi_k(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) dz, \quad (1.45)$$

$$\phi_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \text{ch}(b_k \beta_m (T - t))}{(b_k \beta_m)^2} \sin \beta_m \gamma_k \sin \beta_m (z - l_{k-1}) (U_k^* - u_{k_k}^n), \quad k = \overline{1, n_1 + 1}$$

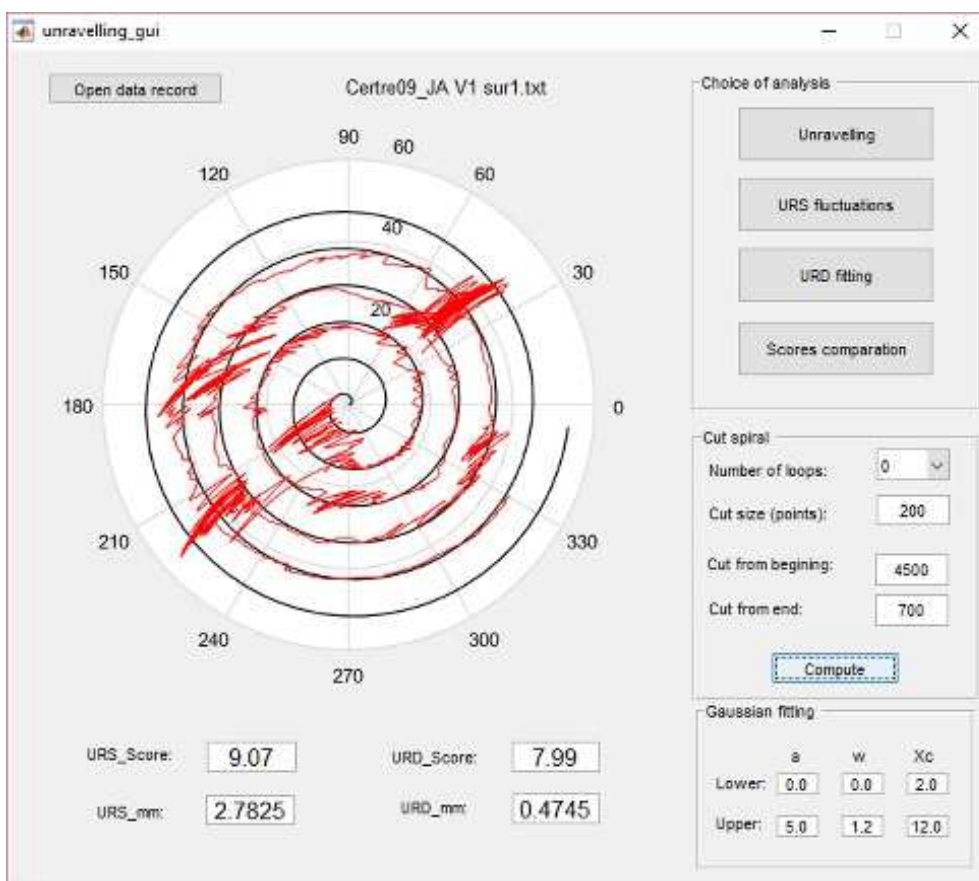
$$u_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \cos(b_k \beta_m t)}{\beta_m} \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \left( S_k^* \frac{1}{(b_k \beta_m)^2} ((-1)^m - 1) + U_{l_{k-1}} \left( 1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right) \right)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) = -\frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m (1 - \cos(b_k \beta_m t)) \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \left( S_k^* \frac{1}{(b_k \beta_m)^2} ((-1)^m - 1) + U_{l_{k-1}} \left( 1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right) \right)$$

**Регуляризаційні вирази** для  $n+1$ -го кроку визначення ідентифікуючої функціональної залежності. Згідно [20, 21], з використанням методу мінімальних похибок для визначення залежності ідентифікації амплітудних компонентів фазової швидкості поширення хвилі АНР  $\tilde{b}_k^{n+1}$  від часу для кожного  $k$ -го елемента АНР  $k = \overline{1, n_1 + 1}$ , отримаємо

$$\tilde{b}_k^{n+1}(t) = \tilde{b}_k^n(t) - \nabla J_{b_k}^n(t) \frac{\|u_k^n(t, \gamma_k, \tilde{b}_k^n) - U_k^*\|^2}{\|\nabla J_{b_k}^n(t)\|_{\gamma_k}^2}, \quad t \in (0, T), \quad k = \overline{1, n_1} \quad (1.46)$$

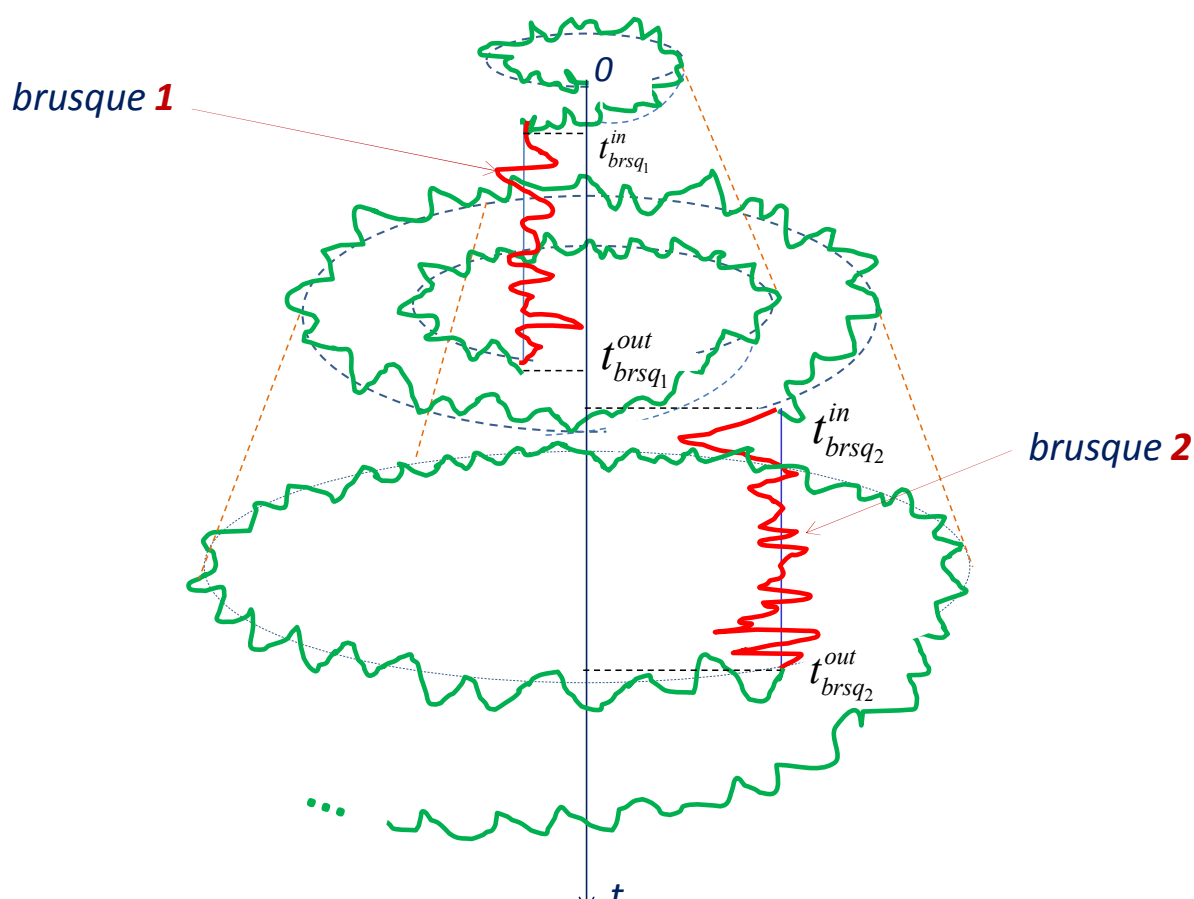
**Просторова візуалізація результатів цифрового аналізу АНР-траєкторії Т-об'єкту.** На рис. 1.5 подані результати цифрового аналізу аномальних неврологічних сильноколивних рухів, виконаних кінцівкою електронного пера на електронному планшеті по обводу тестувального шаблону (спіралі Архімеда) рукою пацієнта з сильновираженими ознаками тремору (Т-об'єкт).



**Рисунок 1.5.** Результати цифрового аналізу сильно коливних АНР-рухів, виконаних кінцівкою електронного пера на електронному планшеті по обводу спіралі Архімеда рукою пацієнта із сильно вираженими ознаками тремору

Як видно з рис. 1.6. такі рухи є сильно неоднорідними, ще крім того вони містять множинну ділянку з аномальними рухами з високими амплітудними та частотними характеристиками. Для більшої і нагляднішої візуалізації графік, що описує траєкторію АНР Т-об'єкту на рис. 1.5 показаний у часово-просторовому форматі, де явно проглядаються ділянки траєкторій аномальних коливних рухів залежних від часу та сильно змінних в маленьких проміжках часу (рис. 1.6).

Такі ділянки АНР-рухів можна детальніше вивчати, розбивши їх на окремі сегменти по досліджуваному часовому проміжку, встановивши залежності їх реальних амплітудних і частотних характеристик від інтегральних часових розподілів когнітивних сигналів вузлів КГМ.



**Рисунок 1.6.** Часово-просторова візуалізація АНР Т-об'єкта, з включенням сегментів сильноколивних аномальних рухів залежних від часу в маленьких проміжках часу

Корисним і ефективним способом аналізу отриманих результатів, є можливість виконувати циклічні обчислення на основі пропорційного

зменшення аналізованих масивів даних. Іншими словами, оцінки отримуються та порівнюються для кожної ітерації обмеження аналізованих даних. Результати, представлені у вигляді частотних та амплітудних характеристик кривої, становлять основу оцінювання стану пацієнта методом комп'ютеризованого діагностування. Важливі елементи розробки – це алгоритми отримання значень параметрів модельованої системи, можливість візуального представлення отриманих результатів, необхідність динамічного задання параметрів системи. Все це дозволяє з більшою наочністю представляти результати та сприяє цільовому використанню технології. Ефективним рішенням та позитивним елементом даної розробки є її імплементація у вигляді окремого модуля, бібліотеки з можливістю постійно оновлювати методи та підтримувати актуальність досліджень. Реалізація програмного забезпечення у такий спосіб сприяє підвищенню адаптивності, зручності використання у різноманітних системах в ході ведення досліджень. Математичні методи, а саме їх алгоритми обчислення, реалізовано у вигляді набору класів з методами, що моделюють поведінку. Програмні модулі, класи, та їх взаємодію реалізовано в вигляді єдиного модуля-бібліотеки, що дозволить гнучко використовувати метод аналізу вхідних даних у різноманітних прикладних задачах та програмах.

За допомогою використання вбудованого модуля 3D-мікроакселерометра в цифрове перо графічного планшета забезпечується умова збереження існуючої задовільної точності вимірів з додатковою можливістю контролю відриву пера від поверхні (вісь Z).

## **Розділ 2. Високопродуктивні методи моделювання та ідентифікації feedback-впливів компететивної адсорбції поглинутих газових забруднень атмосфери на мікро- і макрорівнях у нанопористих системах**

Експериментально-теоретичне дослідження компететивної адсорбції та дифузії декількох газів як компонентів газових забруднень атмосфери на мікро- і макрорівнях у нанопористих системах, включаючи визначення реальних розподілів адсорбованих фаз та досягнення їх рівноважних станів, є особливо важливим у багатьох сферах, таких як розділення газів, гетерогенний каталіз, очищення шарів атмосфери, зменшення вихлопних газів, що сприяють глобальному потеплінню. Використовувана методика NMR-спектроскопії (магнітно-ядерного резонансу) дає зображення, характерне для кожного адсорбованого газу в даний момент та на кожному рівні нанопористої системи, а отже, і розподіл кількох газів при компететивній дифузії та адсорбції. Однак це не дозволяє окремо визначати між- та внутрішньокристалітні величини.

У цьому розділі нами розроблено новий швидкий і високоточний аналітичний метод розрахунку коефіцієнтів дифузії адсорбованих газів у внутрішньому та міжкристалітному просторах нанопористого середовища, використовуючи високоефективні градієнтні методи мінімізації функціоналу-нев'язки і функцій впливу Коші та математичні моделі компететивної адсорбції, а також спектри NMR-даних кожного адсорбованого газу в шарі.

### **2.1. Аналіз стану досліджень**

Знання коефіцієнтів компететивної дифузії та адсорбції компонентів адсорбтиву є надзвичайно важливим, коли гетерогенна каталітична реакція відбувається шляхом протікання газів через нанопористий шар каталізатора. Але загалом розподіл різних адсорбованих компонентів на каталізаторі, дуже неоднорідний і, крім того, дуже мінливий від однієї компоненти до іншої. Тому

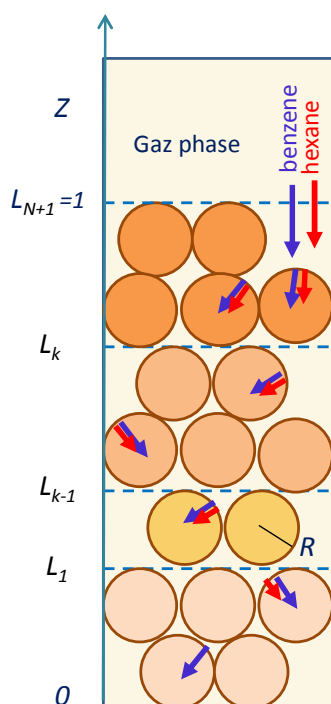
необхідно щоразу визначати коефіцієнти дифузії кожної із компонентів адсорбтиву в присутності інших та його розподіл по товщині шару каталізатора.

Класичний метод спектрального аналізу (H-MRI) може бути прийнятною методикою для контролю компететивної дифузії та адсорбції декількох газів, що проходять через нанопористий шар каталізатора. Однак, оскільки отриманий на виході сигнал не є специфічним для кожного газу, це вимагає, щоб кожен експеримент проводився декілька разів за однакових умов, і кожен раз лише з одним адсорбованим газом. Щоб усунути недоліки класичної візуалізації, нами використано методику NMR–спектроскопії, отримуючи унікальні зображення NMR-сигналів, специфічних для кожної компоненти газової суміші, що дає можливість прослідкувати процес компететивної дифузії та адсорбції всіх компонентів суміші в нанопористому шарі [6, 7]. Зразок зміщується під час адсорбції газу вертикально, та поетапно відносно дуже тонкого NMR–детектора. Передбачається, що об'єм складається з  $N$  тонких шарів нанопористого каталізатора, а область зондування обмежена кожним шаром, так що зміна концентрації газу, поглинутого на рівні кожного шару, отримується як функція часу. Цікавою особливістю цієї методики є її здатність комплексно візуалізувати безпосередньо компететивну дифузію і адсорбцію декількох газів. NMR-сигнали є кількісно характерні для адсорбованих газів, тому вони можуть забезпечувати безпосередньо у кожний момент та на кожному рівні шару розподіл кількох газів, що конкурують у дифузії та адсорбції. В [15] нами відображені експериментальні результати компететивної дифузії та адсорбції бензолу та гексану через нанопористий шар цеоліту. В [16-18] нами розроблено математичну методологію ефективної декомпозиції лінеаризації подібних складних моделей дифузії та адсорбції. В [19], використовуючи операційний метод Гевісайда та інтегральний метод перетворення Лапласа, нами отримані швидкісні аналітичні розв'язки, що дозволяють швидко розрахувати двокомпонентну компететивну адсорбцію в неоднорідному нанопористому каталітичному шарі для дегідратації природного газу. У цьому розділі нами удосконалено методи, які раніше використовувались для обчислення коефіцієнтів дифузії як функцій від часу, збільшуючи точність та

швидкість обчислень за рахунок значного зменшення числа ітерацій. Це дало можливість використовувати їх для компететивної адсорбції декількох газів, що дифундують уздовж об'єму нанопористого середовища.

## 2.2. Експеримент

Техніку візуалізації зображень NMR-сигналів у вузьких зонах робочої області нанопористого каталізатора, які контролює NMR-детектор для низки зразків каталізаторів, що містять адсорбовану фазу, що знаходиться в рівновазі з газовою фазою, нами описано у [15, 16] відповідно.



**Рисунок 2.1.** Дифузія двох газів в шарах нанопористого середовища

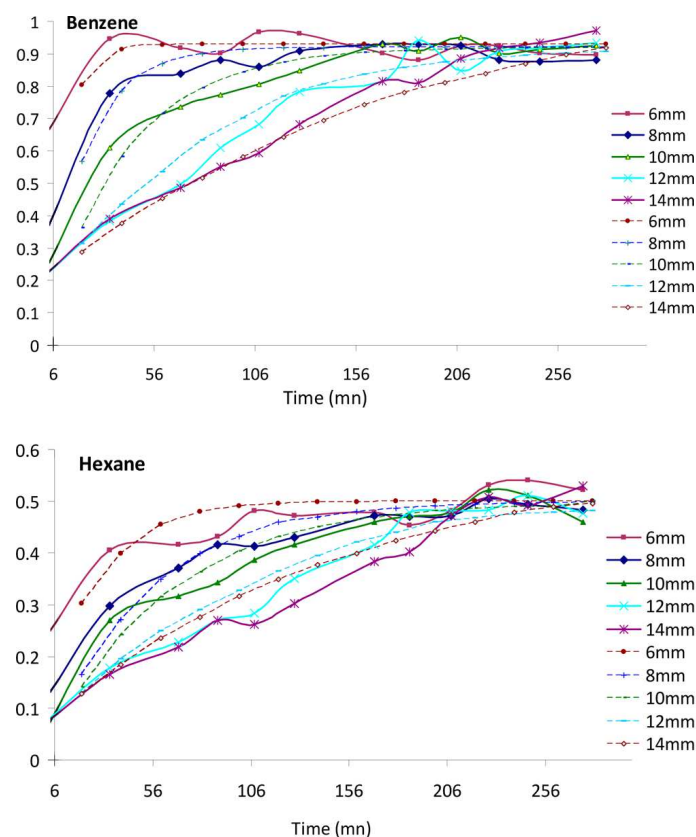
Верхня частина циліндричного шару кристалітів наносередовища піддається постійному тиску кожного газу (рис. 2.1.). Дифузія двох газів є осьовою в макропорах міжкристалітного простору (напрямок  $z$  по висоті,  $l$ , шару) і радіальною в мікропорах середовища. Згідно з експериментальними умовами, нанопористий шар складається з великої кількості,  $N$  - дуже тонких шарів каталізатора, товщиною  $\Delta l_k = l_k - l_{k-1}$ , перпендикулярним до розповсюдження газу в напрямку  $z$ . Відповідні коефіцієнти між- та внутрішньокристалітного простору -  $D_{inter,k}$  та  $D_{intra,k}$  відповідно.



### 2.3. Результати експериментів: Криві конкурентивної адсорбції газоподібних бензолу та гексану

Результати експериментів узагальнені в [16, 17]: спектр кожного газу в кожний момент і на кожному рівні нанопористого каталізатора, а також концентрації двох газів (бензолу та гексану) в нанопористому зразку в конкретний час дифузії. Тут використовується лише зміна концентрації бензолу та гексану на різних рівнях зразка, залежно від часу, на якій ґрунтуються обчислення розподілів коефіцієнтів дифузії та між- і внутрішньокристалітичних концентрацій [16].

На рис. 2.2. наочно видно, що при обраних експериментальних умовах бензол перешкоджає дифузії гексану, і це відбувається в кожен момент. Більше того, можна помітити, що при рівновазі кількість бензолу в просторі нанопор вдвічі перевищує гексан, що вказує кількісно на відносну спорідненість цих двох адсорбатів.



**Рисунок 2.2.** Еволюція концентрації бензолу та гексану (безрозмірні концентрації) на різних рівнях нанопористого шару (суцільні лінії - експериментальні криві; пунктирні - модельні розподіли) [16]

## 2.4. Математична модель компететивної адсорбції та дифузії в нанопористих системах

### 2.4.1. Компететивна модель адсорбції в загальному формулюванні

Представлена модель схожа на біполярну модель [7-9]. Розвиваючи підхід, описаний Рутвеном і Каргером [10] та Петриком М. та ін. [18] щодо моделювання складного процесу компететивної адсорбції та дифузії, вкажемо найважливіші гіпотези, що визначають кінетику процесу.

Загальна гіпотеза, прийнята для розробки математичної моделі, представленої в найбільш загальному формулюванні, полягає в тому, що взаємодія між адсорбованими молекулами декількох газів та центрами адсорбції на поверхні в нанопористих кристалітах визначається нелінійною функцією рівноваги типу Ленгмюра з урахуванням фізичних припущень [10, 11]:

1. Компететивний процес дифузії передбачає два типи масопереносу: дифузію в макропорах (міжкристалітний простір) та дифузію в мікропорах кристалітів (внутрішньокристалітний простір).

2. Під час еволюції системи до рівня рівноваги спостерігаються градієнти концентрацій в макропорах та в мікропорах;

3. Всі кристаліти сферичні і мають однаковий радіус  $R$ ; кристалітний шар рівномірно розподілений.

4. Адсорбовані молекули утримуються поверхнею нанопор впродовж певного часу, в цілому залежно від температури газового потоку і середовища.

Враховуючи ці гіпотези, нами розроблена нелінійна компететивна модель адсорбції

$$\frac{\partial C_s(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_s}}{l^2} \frac{\partial^2 C_s}{\partial Z^2} - e_{inter} \tilde{K}_s \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial Q_s}{\partial X} \right)_{X=l}, \quad (2.1)$$

$$-H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - \sum_{s=1}^m \mu_s \Delta H_s \frac{\partial \bar{Q}_s}{\partial t} - 2 \frac{\alpha_h}{R_{column}} T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial Q_s(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_s}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_s}{\partial X} \right) \quad (2.3)$$

з початковими умовами:

$$C_s(t=0, Z) = 0; \quad Q_s(t=0, X, Z) = 0; \quad Z \in (0, 1), \quad X \in (0, 1), \quad s = \overline{1, m}, \quad (2.4)$$

крайові умови для координати X нанопористої частинки:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_s(t, X=0, Z) = 0 \quad (\text{умови симетрії}), \quad (2.5)$$

$$Q_s(t, X=1, Z) = \frac{K_s(T) C_s(t, Z)}{1 + \sum_{s_I=1}^m K_{s_I}(T) C_{s_I}(t, Z)}, \quad s = \overline{1, m} \quad (\text{рівновага Ленгмюра}), \quad (2.6)$$

крайові умови для координати Z:

$$C_s(t, 1) = 1, \quad \frac{\partial C_s}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \quad t > 0 \quad (2.7)$$

$$T(t, Z)|_{Z=1} = T_{initial}, \quad \frac{\partial T}{\partial Z}(t, Z)|_{Z=0} = 0. \quad (2.8)$$

тут  $K_s(T) = k_{0s} \exp\left(-\frac{\Delta H_s}{R_g T}\right)$ . Значення символів наведено в номенклатурі розділу.

Неізотермічну модель (2.1) - (2.8) можна легко перетворити на ізотермічну модель, видаливши з системи рівняння теплового балансу (2.2) та умови (2.8) і замінивши функції  $K_s(T)$  відповідними константами рівноваги  $K_s$ . Коефіцієнти компететивної дифузії  $D_{intra_s}$  і  $D_{inter_s}$  можуть розглядатися як функції часу і положення частинки в нанопористому шарі.

#### **2.4.2. Обернена модель ідентифікації коефіцієнтів компететивної дифузії суміші двох компонентів забруднень атмосфери (бензол-гексан)**

На основі розробленої нелінійної моделі компететивної адсорбції (2.1) - (2.8) побудуємо обернену модель для ідентифікації коефіцієнтів компететивної дифузії  $D_{intra_s}$  та  $D_{inter_s}$  як функцію часу та координати в нанопористому середовищі.

Розглянемо математичну модель кінетики компететивної адсорбції і дифузії газу в тонких шарах нанопористого середовища, визначеного областями:  $\Omega_{k_i} = (0, t^{total}) \times \Omega_k$ ,  $(\Omega_k = (L_{k-1}, L_k), k = \overline{1, N+1}, L_0 = 0 < L_1 < \dots < L_{N+1} = 1)$  у вигляді системи диференціальних рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial C_{s_k}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_{s_k}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_k}}{\partial Z^2} - e_{inter_k} \tilde{K}_{s_k} \frac{D_{intra_{s_k}}}{R^2} \left( \frac{\partial Q_{s_k}}{\partial X} \right)_{X=1}, \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial Q_{s_k}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_{s_k}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_{s_k}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_k}}{\partial X} \right) \quad (2.10)$$

з початковими умовами:

$$C_{s_k}(t=0, Z) = 0; \quad Q_{s_k}(t=0, X, Z) = 0; \quad X \in (0, 1), \quad Z \in \Omega_k, \quad k = \overline{1, N+1}, \quad (2.11)$$

крайовими та інтерфейсними умовами для координати Z:

$$C_{s_1}(t, L_1) = 1, \quad \frac{\partial C_{s_1}}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \quad t \in (0, t^{total}); \quad (2.12)$$

$$\left[ C_{s_k}(t, Z) - C_{s_k}(t, Z) \right]_{Z=L_k} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial Z} \left[ D_{inter_{s_{k-1}}} C_{s_{k-1}}(t, Z) - D_{inter_{s_k}} C_{s_k}(t, Z) \right]_{Z=L_k} = 0, \quad (2.13)$$

$$k = \overline{1, N}, \quad t \in (0, t^{total});$$

та крайовими умовами для координати X:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_{s_k}(t, X=0, Z) = 0, \quad Q_{s_k}(t, X=1, Z) = K_s C_{s_k}(t, Z) \quad (\text{умови рівноваги}), \quad (2.14)$$

$$Z \in \Omega_k, \quad k = \overline{1, N+1};$$

Розглядається ще одна додаткова умова спостереження (що містить NMR-експериментальні дані):

$$\left[ C_{s_k}(t, Z) + \bar{Q}_{s_k}(t, Z) \right]_{h_k} = \omega_{s_k}(t, Z)_{h_k}, \quad s = \overline{1, 2}; \quad h_k \in \Omega_k. \quad (2.15)$$

Задача ідентифікації (2.9) - (2.15) полягає у знаходженні невідомих функцій  $D_{intra_s} \in \Omega_t, D_{inter_s} \in \Omega_t$  ( $D_{intra_s} > 0, D_{inter_s} > 0, s = \overline{1, 2}$ ), коли сумарна концентрація в макро- та нанопорах  $C_{s_k}(t, Z) + \bar{Q}_{s_k}(t, Z)$  задовольняє умові (2.15) для кожної точки  $h_k \subset \Omega_k$   $k$ -го нанопористого шару [9, 18].

Тут:

$$e_{inter_k} = \frac{\varepsilon_{inter_k} C_{s_k}}{\varepsilon_{inter_k} C_{s_k} + (1 - \varepsilon_{inter_k}) q_{s_k}} \approx \frac{\varepsilon_{inter_k}}{(1 - \varepsilon_{inter_k}) \tilde{K}_{s_k}}, \quad \tilde{K}_{s_k} = \frac{q_{s_k \infty}}{c_{s_k \infty}},$$

$$\bar{Q}_s(t, Z) = \int_0^1 Q_s(t, X, Z) X dX \quad - \text{середня концентрація адсорбованої компоненти } s \text{ в}$$

нанопорах;  $\omega_s(t, Z)|_{h_k}$  - загальний експериментальний розподіл концентрації  $s$ -ї компоненти в макро- та нанопорах при  $h_k \in \Omega_k$  (результати NMR дані, рис. 2.2).

### 2.4.3. Ітераційний градієнтний метод ідентифікації компетитивних коефіцієнтів дифузії

Ідентифікація коефіцієнтів  $D_{intra_{s_k}}$  і  $D_{inter_{s_k}}$  є складною математичною задачею.

В загальному випадку неможливо отримати правильну постановку задачі (2.9) - (2.15) та побудувати єдиний аналітичний розв'язок через складність врахування всіх фізичних параметрів (коливання температури та тиску, структури кристалітів, нелінійність ізотерм Ленгмюра та ін.), а також недостатня кількість достовірних експериментальних даних, похибки вимірювань та інші фактори. Тому, згідно з принципом Тихонова [22], пізніше підходами, розробленими Сергієнком, Дейнекою і Петриком [21, 24], Ліонсом [23] та ін., обчислення коефіцієнтів дифузії вимагає використання моделі для кожної ітерації, мінімізуючи різницю між розрахованими значеннями та експериментальними даними.

Ідентифікація коефіцієнтів дифузії (2.9) - (2.15) зводиться до задачі мінімізації функціоналу-нев'язки (2.16) між модельним розв'язком та експериментальними даними, при цьому розв'язок поступово уточнюється за допомогою спеціальної процедури обчислення, яка використовує швидкі високоефективні градієнтні методи [15, 16, 20, 24].

Відповідно до [16, 20], використовуючи градієнтний метод мінімізації похибки для обчислення  $D_{intra_{s_k}}$  та  $D_{inter_{s_k}}$   $s$ -ої дифундової компоненти, ми отримуємо ітераційний вираз для  $n + 1$ -го етапу ідентифікації:

$$D_{intra_{s_k}}^{n+1}(t) = D_{intra_{s_k}}^n(t) - \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t) \frac{\left[ C_{s_k} \left( D_{inter_{s_k}}^n, D_{intra_{s_k}}^n; t, h_k \right) + \bar{Q}_{s_k} \left( D_{inter_{s_k}}^n, D_{intra_{s_k}}^n; t, h_k \right) - \omega_{s_k}(t) \right]^2}{\left\| \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t) \right\|^2 + \left\| \nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t) \right\|^2},$$

$$D_{inter_{s_k}}^{n+1}(t) = D_{inter_{s_k}}^n(t) - \nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t) \times$$

$$\times \frac{\left[ C_{s_k} \left( D_{inter_{s_k}}^n, D_{intra_{s_k}}^n; t, h_k \right) + \bar{Q}_{s_k} \left( D_{inter_{s_k}}^n, D_{intra_{s_k}}^n; t, h_k \right) - \omega_{s_k}(t) \right]^2}{\left\| \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t) \right\|^2 + \left\| \nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t) \right\|^2}, t \in (0, t^{total}) \quad (2.16)$$

де:  $J(D_{inter_{s_k}}, D_{intra_{s_k}})$  - функція похибки, яка описує відхилення модельного розв'язку від експериментальних даних  $h_k \in \Omega_k$ , та записується як:

$$J(D_{inter_{s_k}}, D_{intra_{s_k}}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left[ C_s(\tau, Z, D_{inter_{s_k}}, D_{intra_{s_k}}) + \bar{Q}_s(t, Z, D_{inter_{s_k}}, D_{intra_{s_k}}) - M_{s_k}(t) \right]_{h_k}^2 d\tau, \quad (2.17)$$

$$h_k \in \Omega_k, \quad k = \overline{1, N+1},$$

$\nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t), \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t)$  - градієнти функціоналу-нев'язки,  $J(D_{inter_{s_k}}, D_{intra_{s_k}})$ .

$$\left\| \nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t) \right\|^2 = \int_0^T \left[ \nabla J_{D_{inter_{s_k}}}^n(t) \right]^2 dt, \quad \left\| \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t) \right\|^2 = \int_0^T \left[ \nabla J_{D_{intra_{s_k}}}^n(t) \right]^2 dt.$$

#### 2.4.4. Аналітичний метод ідентифікації коефіцієнтів компететивної дифузії

За допомогою ітераційних градієнтних методів на основі мінімізації функціоналу-нев'язки розроблені дуже точні та швидкі аналітичні методи, що дозволяють виразити коефіцієнти дифузії у вигляді залежних від часу аналітичних функцій (2.16). Для їх ефективного використання необхідно мати розгалужену експериментальну базу даних, що має щонайменше дві експериментальні умови спостереження для одночасного обчислення  $D_{intra_{s_k}}$  та  $D_{inter_{s_k}}$  коефіцієнтів. Наші експериментальні дослідження були проведені для п'яти  $Z$ -позицій нанопористого шару для кожної з адсорбованих компонент. Даних було недостатньо для повного застосування цього методу одночасної ідентифікації до цих п'яти позицій. Тому використовувалась комбінація аналітичного методу та ітераційного градієнтного методу для визначення коефіцієнтів компететивної дифузії.

На основі задачі (2.9) - (2.15), можна обчислити  $D_{intra_{s_k}}, D_{inter_{s_k}}$  як функцію від часу, використовуючи експериментальні дані, отримані методом NMR-сканування. Зокрема, у рівняннях (2.9) та (2.10) компететивні коефіцієнти дифузії можуть бути встановлені безпосередньо як функції часу  $t$ :  $D_{intra_{s_k}}(t), D_{inter_{s_k}}(t)$ . У цьому випадку крайова умова (2.11) може бути задана в більш загальній формі - також як функція часу.

$$C_{s_l}(t, l) = C_s^{initial}(t). \quad (2.18)$$

Експериментальні умови NMR-сканування визначаються одночасно для всіх  $P$  поверхонь спостереження:

$$\left[ C_{sk}(t, Z) + \int_0^1 Q_{sk}(t, X, Z) dX \right]_{Z=h_i} = \omega_{sk_i}(t, Z) \Big|_{h_i}, \quad i = \overline{1, P}, \quad s = \overline{1, 2}; \quad h_i \in \bigcup_{k=1}^{N+1} \Omega_k, \quad (2.19)$$

Для простоти здійснимо перепозначення:  $u(t, Z) = C_{sk}(t, Z)$ ,  $v(t, X, Z) = Q_{sk}(t, X, Z)$   
 $b(t) = D_{intra_{sk}}(t) / R^2$ ,  $\chi_i(t) = M_{sk_i}(t)$ ,  $i = \overline{1, P}$  і, вважаючи рівняння (2.10) записане у плоскій формі, його розв'язок можна записати як [26]:

$$v(t, X, Z) = - \int_0^t H_{4\xi}^{(2)}(t, \tau, X, 1) b(\tau) u(\tau, Z) d\tau, \quad (2.20)$$

де  $H_{4\xi}^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = -2 \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\eta_m^2(\theta_2(t) - \theta_2(\tau))} \eta_m \cos \eta_m X \cdot (-1)^m$ .

Тут  $H_k^{(2)}$ ,  $k = \overline{1, 4}$  - функції впливу частинки, що мають вигляд [12]:

$$H_4^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\eta_m^2(\theta_2(t) - \theta_2(\tau))} \cos \eta_m X \cos \eta_m \xi, \quad \eta_m = \frac{2m+1}{2} \pi,$$

$$H_3^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} e^{-\eta_m^2(\theta_2(t) - \theta_2(\tau))} \sin \eta_m X \sin \eta_m \xi, \quad \eta_m = \frac{2m+1}{2} \pi,$$

$$H_2^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = 1 + 2 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\eta_m^2(\theta_2(t) - \theta_2(\tau))} \cos \eta_m X \cdot \cos \eta_m \xi, \quad \eta_m = m\pi, \quad \theta_2(t) = \int_0^t b(s) ds.$$

Тут позначення  $H_{4\tau\xi}^{(2)}$ ,  $H_{4\xi\xi}^{(2)}$  означає частинні похідні функції впливу  $H_4^{(2)}$  відносно визначених змінних  $\tau$  і  $\xi$  відповідно.

Виходячи з формули (2.20), отримуємо

$$v_X(t, X, Z) = - \int_0^t H_{4\xi X}^{(2)}(t, \tau, X, 1) b(\tau) u(\tau, Z) d\tau. \quad (2.21)$$

Інтегрування частинами (2.21) з урахуванням співвідношень

$$H_{4X}^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = -H_{3\xi}^{(2)}(t, \tau, X, \xi), \quad H_{3\tau}^{(2)}(t, \tau, X, \xi) = -b(\tau) H_{3\xi\xi}^{(2)}(t, \tau, X, \xi),$$

і початкової умови  $u|_{t=0} = 0$  дає

$$v_X(t, X, Z) = \int_0^t H_3^{(2)}(t, \tau, X, 1) u_\tau(\tau, Z) d\tau. \quad (2.22)$$

Підставляємо вираз  $v(t, X, Z)$  (2.20) в умовах спостереження (2.19):

$$u(t, h_i) - \int_0^1 X dX \int_0^t H_{4\xi}^{(2)}(t, \tau, X, 1) b(\tau) u(\tau, h_i) d\tau = \chi_i(t), \quad i = \overline{1, P}. \quad (2.23)$$

Інтегрування частинами (2.23) та врахування рівності

$$H_{4\xi}^{(2)}(t, \tau, X, 1) = -H_{3X}^{(2)}(t, \tau, X, 1),$$

дозволяє отримати [26]:

$$\begin{aligned} u(t, h_i) = \chi_i(t) - \int_0^t H_3^{(2)}(t, \tau, 1, 1) b(\tau) u(\tau, h_i) d\tau + \\ + \int_0^t \int_0^1 H_3^{(2)}(t, \tau, X, 1) b(\tau) u(\tau, h_i) dX d\tau, \quad i = \overline{1, P}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Спочатку приймемо  $u(t, h_P) = \beta_{sP}(t) = C_s^{initial}(t)$ , де  $Z = h_P$  - поверхня спостереження, що наближається до точки входу в робочу зону  $Z = 1$ .

Тоді рівняння (2.24) для  $i = P$  буде наступним:

$$\int_0^t H_3^{(2)}(t, \tau, 1, 1) b(\tau) \beta_{sP}(t) d\tau = \chi_{sP}(t) - \mu_{sP}(t) + \int_0^t \int_0^1 H_3^{(2)}(t, \tau, x, 1) b(\tau) \mu_{sP}(t) dx d\tau. \quad (2.25)$$

Застосуванням до (2.25) формули  $\int_{\tau}^t b(\sigma) H_2^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) H_4^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) d\sigma = 1$ ,

отриманої в [25]:  $H_3^{(2)}(t, \sigma, 1, 1) = H_4^{(2)}(t, \sigma, 0, 0)$ , отримуємо:

$$\begin{aligned} \int_0^t b(\tau) \mu_{sP}(\tau) d\tau = \int_0^t H_2^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) b(\sigma) (\chi_{sP}(\sigma) - \mu_{sP}(\sigma)) d\sigma + \\ + \int_0^t H_2^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) b(\sigma) d\sigma \int_0^{\sigma} \int_0^1 H_3^{(2)}(\sigma, \tau, x, 1) b(\tau) \mu_{sP}(t) dX d\tau, \quad t \in [0, t^{total}] \end{aligned} \quad (2.26)$$

Диференціюючи (2.26) по  $t$ , після низки перетворень отримуємо

$$\mu_{sP}(t) = \int_0^t H_2^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) (b(\sigma) \mu_{sP}(\sigma) + \chi_{sP}(\sigma) - \mu_{sP}(\sigma)) d\sigma. \quad (2.27)$$

Після множення рівняння (2.27) на вираз  $H_4^{(2)}(t, \sigma, 0, 0) b(\sigma)$ , інтегрування по  $\tau$  та диференціювання по  $t$ :

$$b(t) \mu_{sP}(t) + \chi_{sP}(\sigma) - \beta_{sP}(\sigma) = b(t) \int_0^t H_2^{(2)}(t, \tau, 0, 0) \beta'_{sP}(\tau) d\tau. \quad (2.28)$$

В результаті отримуємо вираз для обчислення коефіцієнта компететивної дифузії у внутрішньокристалітному просторі:

$$D_{intra_{sP}}(t) \equiv R^2 b(t) = R^2 \frac{\chi'_{sP}(t) - \beta'_{sP}(t)}{\int_0^t H_2^{(2)}(t, \tau, 0, 0) \beta'_{sP}(\tau) d\tau - \beta_{sP}(t)}, \quad t \in [0, t^{total}]. \quad (2.29)$$



Використовуючи обчислені за формулою (2.29)  $D_{intra_{sp}}(t)$  на межі спостереження  $h_p$ , визначимо градієнтним методом  $D_{inter_{sp}}(t)$ . Підставляючи  $D_{intra_{sp}}(t)$  і  $D_{inter_{sp}}(t)$  в  $h_p$ , ми обчислюємо  $C_{sk}(t, h_p)$ , підставляючи його в  $\beta_{SP-1}(t) = C_{sk}(t, h_p)$  для наступних коефіцієнтів  $D_{inter_{si}}(t)$ ,  $i = \overline{P-1, 1}$ .

Всі наступні коефіцієнти  $D_{intra_{si}}(t)$  розраховуються за формулою

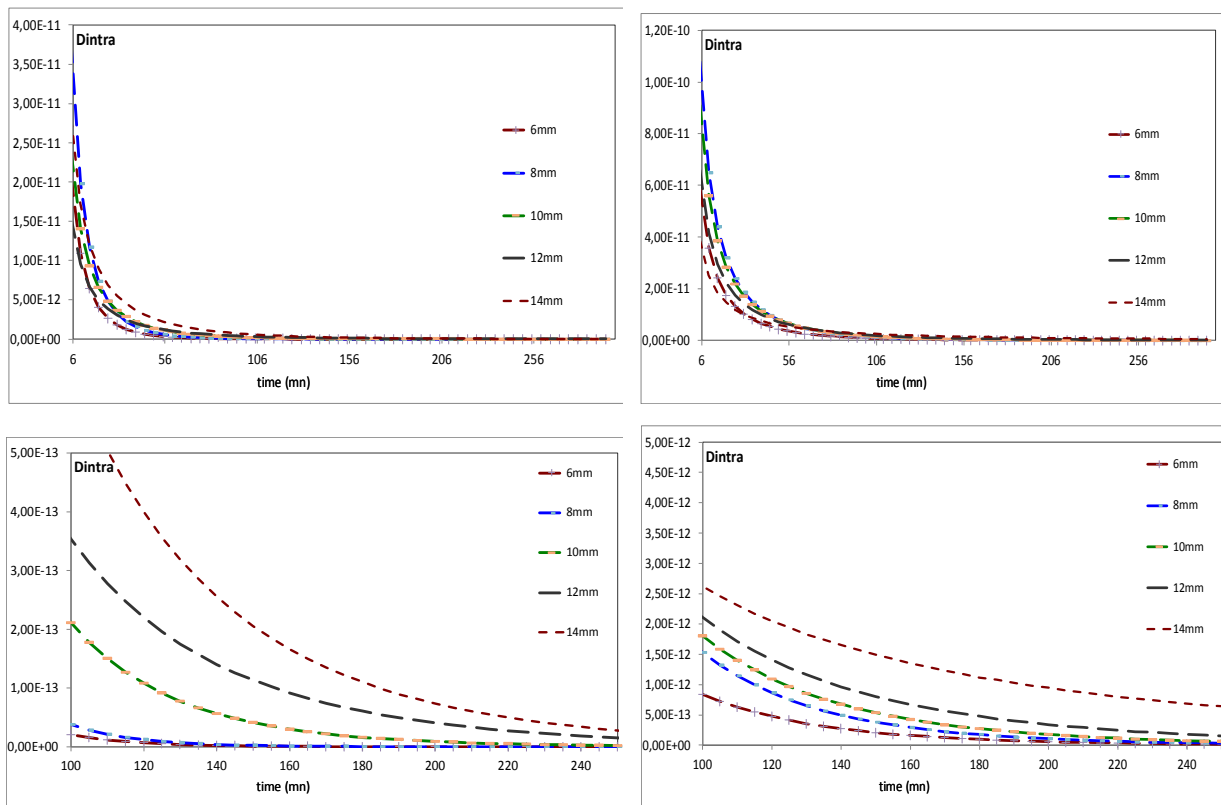
$$D_{intra_{si}}(t) \equiv R^2 b_{si}(t) = R^2 \frac{\chi'_{si}(t) - \beta'_{si}(t)}{\int_0^t H_2^{(2)}(t, \tau, 0, 0) \beta'_{si}(\tau) d\tau - \beta_{si}(t)}, \quad i = \overline{P-1, 1} \quad (2.30)$$

з паралельними обчисленнями  $D_{inter_{si}}(t)$ ,  $i = \overline{P-1, 1}$ .

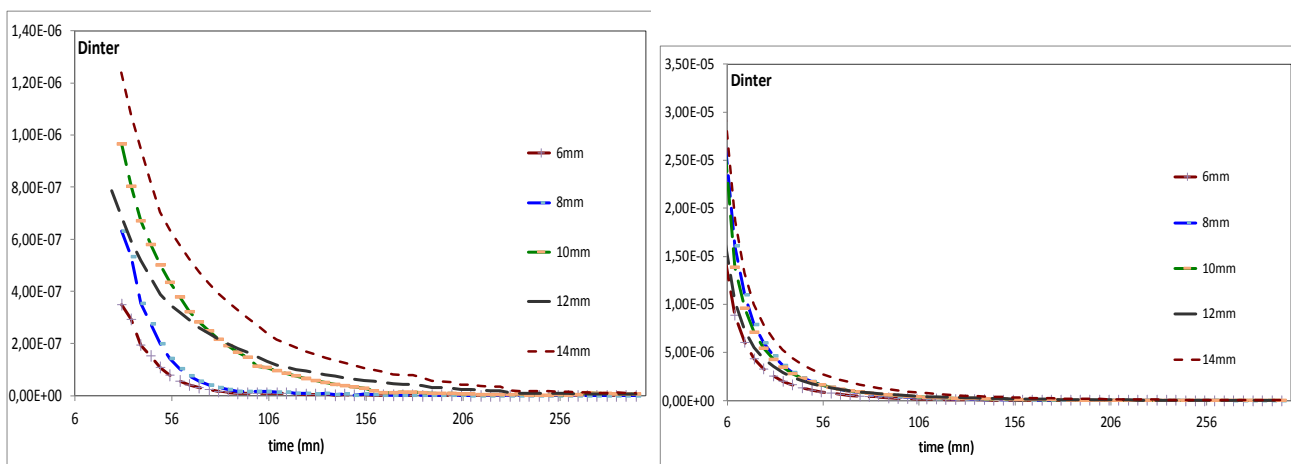
## 2.5 Числове моделювання та аналіз: коефіцієнти компететивної дифузії. Профілі концентрації в між- та внутрішньокристалітних просторах

Варіація коефіцієнтів внутрішньокристалітної дифузії бензолу та гексану від часу,  $D_{intra_{1,k}}$  і  $D_{intra_{2,k}}$  відповідно, представлені на рис. 2.3 для п'яти різних позицій координат: 6, 8, 10, 12 та 14 мм, починаючи від верхнього шару. Криві для бензолу  $D_{intra_{1,k}}$  є псевдоекспоненціальними.  $D_{intra_{1,k}}$  зменшується від  $9.0 \text{ E-13}$  до  $1.0 \text{ E-14} \text{ м}^2/\text{с}$  (стан рівноваги) залежно від положення нанопористої частинки та часу, а також від кількості адсорбованого газу. Форми варіацій  $D_{intra_{2,k}}$  для гексану приблизно однакові, але значення коефіцієнтів дифузії є дещо більшими і змінюються в діапазоні тривалості адсорбції від 100 до 260 хв в межах, приблизно від  $9.0 \text{ E-12}$  до  $3.0 \text{ E-13} \text{ м}^2/\text{с}$ .

На рис. 2.4. представлені розподіли коефіцієнтів дифузії бензолу та гексану від часу,  $D_{inter_{1,k}}$  та  $D_{inter_{2,k}}$  в міжкристалітному просторі. Ці коефіцієнти зменшуються з часом від  $2.0 \text{ E-6}$  до  $1.0 \text{ E-7} \text{ м}^2/\text{с}$  (положення рівноваги) для бензолу та від  $3 \text{ E-5}$  до  $1.0 \text{ E-6} \text{ м}^2/\text{с}$  для гексану, залежно від положення шару та підвищення концентрації адсорбату в нанопорах.



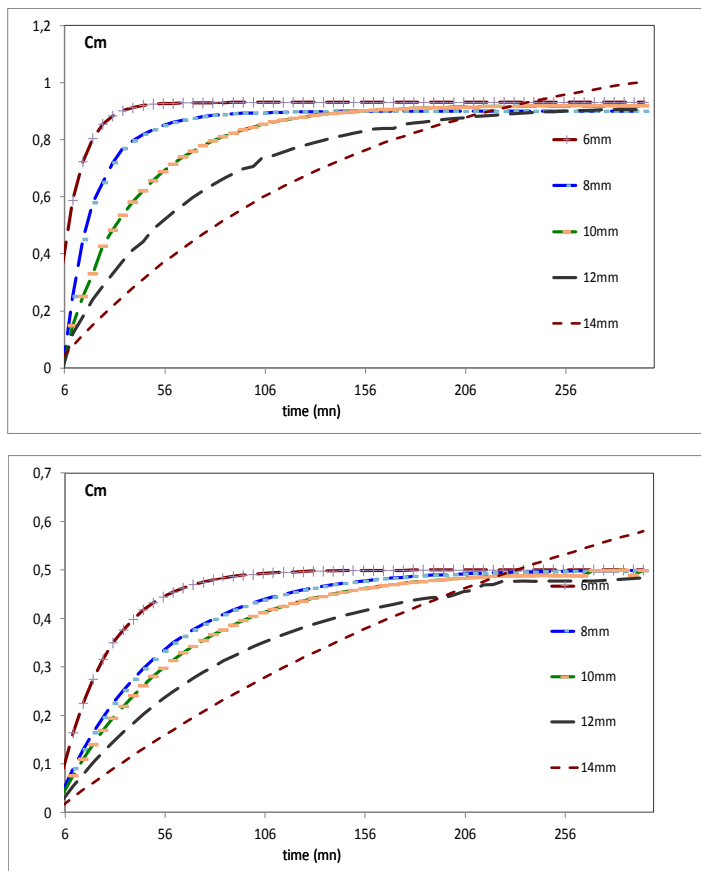
**Рисунок 2.3.** Варіація коефіцієнтів дифузії внутрішньокристалітної (безрозмірні одиниці) бензолу  $D_{intra_{1,k}}$  (ліворуч) та гексану  $D_{intra_{2,k}}$  (праворуч) від часу, для різних положеннях шару; верхні графіки - діапазон часу 6-240 хв, нижній- діапазон часу 100-240 хв



**Рисунок 2.4.** Варіації коефіцієнтів конкурентивної дифузії міжкристалітному просторі ( $m^2/c$ ) для бензолу (ліворуч) та гексану (праворуч) від часу в різних положеннях шару

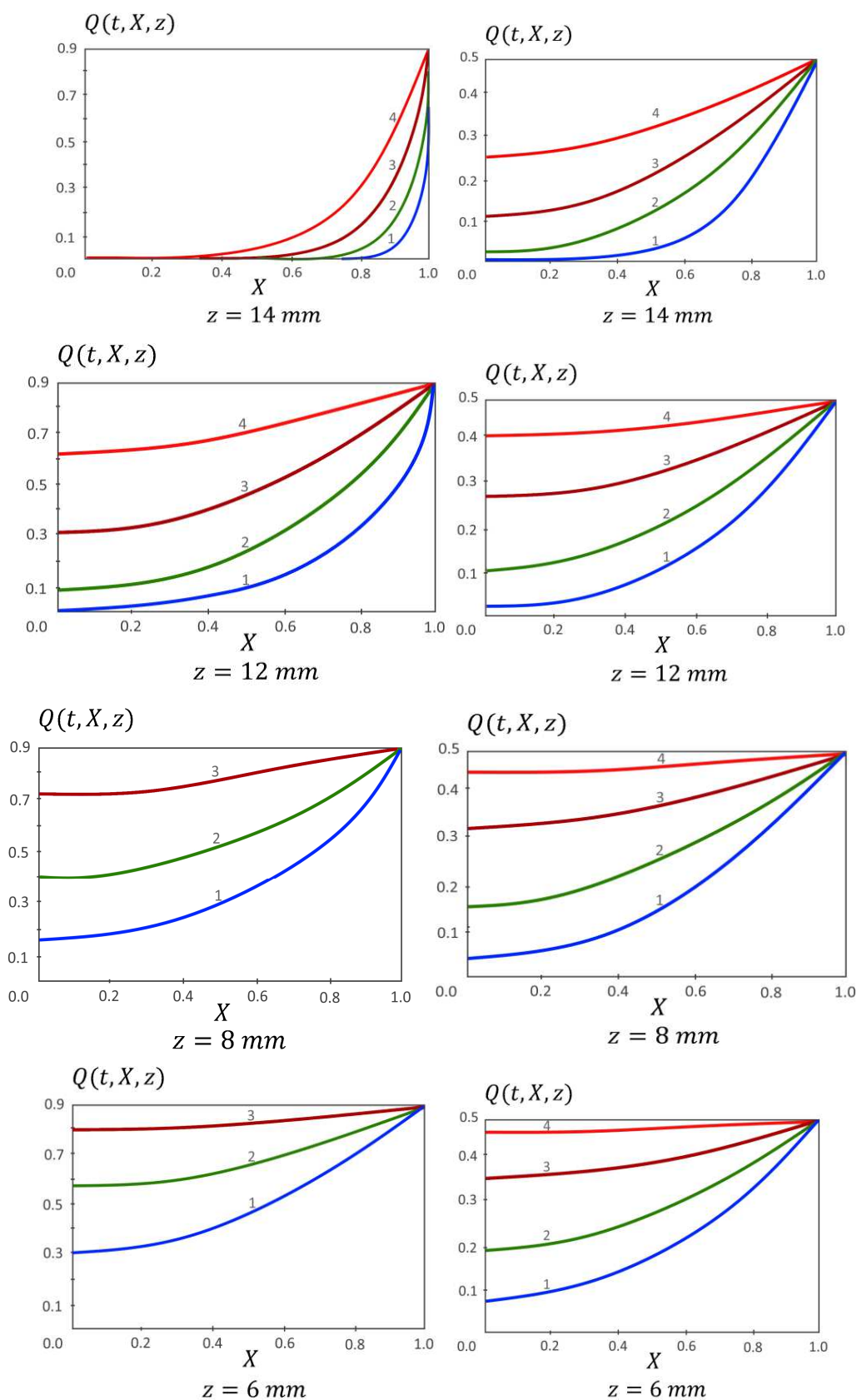
На рисунку 2.5. показано розподіли модельних концентрацій  $C$  для бензолу та гексану в часі для міжкристалітного простору. Як видно, ці

концентрації наближаються до рівноважних значень за час дифузії близько 250 хв. Але коливання концентрацій у часі для двох газів досить різні.



**Рисунок 2.5.** Розподіли концентрації адсорбтиву у міжкристалітному просторі, обчисленої для бензолу (зверху) та гексану (знизу), в залежності від часу та в різних положеннях у шарі

На рис. 2.6. показано розподіли концентрацій  $Q(t, X, z)$  адсорбованого бензолу (ліворуч) та гексану (праворуч) у нанопорах внутрішньокристалітного простору від поверхні (абсциса -1) до центру (абсциса -0) кристалітів, розташованих на відстані від 6 до 14 мм від верху шару, і через 25 - 200 хв. дифузії (a, b, c і d відповідно). Градієнти збільшуються, а середні концентрації зменшуються зі збільшенням відстані частинок від надходження газів. Частинки розміром 6 і 8 мм насичуються бензолом через 100 хв., однак в цей же час гексаном не насичуються.



**Рисунок 2.6.** Розподіли концентрацій бензолу (ліворуч) та гексану (праворуч) у внутрішньокристалітному просторі від поверхні (абсциса 1) до центру (абсциса 0) кристалітів у різний час 1- темно-синій:  $t = 25$  хв. ; 2 - зелений:  $t = 50$  хв.; 3 - коричневий:  $t = 100$  хв. ; 4 - червоний:  $t = 200$  хв.

## 2.6. Ітераційний градієнтний метод ідентифікації коефіцієнтів компететивної дифузії

Методика вирішення прямої крайової задачі (2.9) - (2.15), яка описує процес дифузії в неоднорідному нанопористому шарі, розроблена в [16, 20]. Відповідно до [20] процедура визначення коефіцієнтів дифузії (2.16) вимагає спеціальної методики розрахунку градієнтів  $\nabla J_{D_{intra_{sk}}}^n(t)$ ,  $\nabla J_{D_{inter_{sk}}}^n(t)$  функціоналу-нев'язки (2.17). Це призводить до проблеми оптимізації розширеного функціоналу Лагранжа [21].

$$\Phi(D_{inter_{sk}}, D_{intra_{sk}}) = J_s + I_{s_{macro}} + I_{s_{micro}}, \quad (2.31)$$

де  $I_{s_{macro}}, I_{s_{micro}}$  компоненти, задані рівняннями (2.32) та (2.33), що відповідають макро- та мікропористому середовищу відповідно:

$$I_{s_{macro}} = \int_0^T \int_{L_{k-1}}^{L_k} \phi_{s_k}(t, Z) \left( \frac{\partial C_{s_k}}{\partial t} - \frac{D_{inter_{sk}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_k}}{\partial Z^2} + e_{inter_{sk}} K_{s_k} \frac{D_{intra_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial Q(t, X, Z)_{s_k}}{\partial X} \right) \right)_{X=1} dZ dt \quad (2.32)$$

$$I_{s_{micro}} = \int_0^T \int_0^1 \int_{L_{k-1}}^{L_k} \psi_{s_k}(t, X, Z) \left( \frac{\partial Q_{s_k}(t, X, Z)}{\partial t} - \frac{D_{intra_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_{s_k}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_k}}{\partial X} \right) \right) X dX dZ dt, \quad (2.33)$$

$J_s$  є функціоналом (2.17),  $\phi_{s_k}, \psi_{s_k}, s, \overline{1,2}$  – невідомі фактори Лагранжа, які слід визначити із умови стаціонарності стану розширеного функціоналу  $\Phi(D_{inter_{sk}}, D_{intra_{sk}})$  [16, 21]:

$$\Delta \Phi(D_{inter_{sk}}, D_{intra_{sk}}) \equiv \Delta J_s + \Delta I_{s_{macro}} + \Delta I_{s_{micro}} = 0. \quad (2.34)$$

Розрахунок компонентів в формулі (2.34) здійснюється в припущенні, що значення  $D_{inter_{sk}}, D_{intra_{sk}}$  збільшуються на  $\Delta D_{inter_{sk}}, \Delta D_{intra_{sk}}$ . В результаті концентрація  $C_{s_k}(t, Z)$  змінюється з кроком  $\Delta C_{s_k}(t, Z)$ , а концентрація  $Q_{s_k}(t, X, Z)$  з приростом  $\Delta Q_{s_k}(t, X, Z)$ ,  $s = \overline{1,2}$ .

**Спряжена задача.** Розрахунок приростів  $\Delta J_s, \Delta I_{s_{macro}}, \Delta I_{s_{micro}}$  в (2.34) (використання інтегрування частинами та початкові та крайові умови прямої

задачі (2.9) - (2.15)) приводить до розв'язання допоміжної спряженої задачі для визначення множників Лагранжа  $\phi_{s_k}$ ,  $\psi_{s_k}$  функціоналу (2.31) [20] :

$$\left. \frac{\partial \phi_{s_k}(t, Z)}{\partial t} + \frac{D_{\text{inter}_{s_k}}}{l^2} \frac{\partial^2 \phi_{s_k}}{\partial Z^2} + e_{\text{inter}_k} K_{s_k} \frac{D_{\text{intra}_{s_k}}}{R^2} \frac{\partial \psi_{s_k}(t, X, Z)}{\partial X} \right|_{X=1} = E_{s_k}^n(t) \delta(Z - h_k) \quad (2.35)$$

де  $E_{s_k}^n(t) = C_{s_k} \left( D_{\text{intra}_{s_k}}^n, D_{\text{inter}_{s_k}}^n; t, h_k \right) + \bar{Q}_{s_k} \left( D_{\text{intra}_{s_k}}^n, D_{\text{inter}_{s_k}}^n; t, h_k \right) - M_{s_k}(t)$ ,  $\delta(Z - h_k)$  - функція Дірака [22].

$$\frac{\partial \psi_{s_k}(t, X, Z)}{\partial t} + \frac{D_{\text{intra}_{s_k}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 \psi_{s_k}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial \psi_{s_k}}{\partial X} \right) = E_{s_k}^n(t) \delta(Z - h_k). \quad (2.36)$$

$$\phi_{s_k}(t, Z)|_{t=t^{\text{total}}} = 0; \quad \psi_{s_k}(t, X, Z)|_{t=t^{\text{total}}} = 0 \quad (\text{умови при } t = t^{\text{total}}); \quad (2.37)$$

$$\frac{\partial}{\partial X} \psi_{s_k}(t, X, Z)|_{X=0} = 0; \quad \psi_{s_k}(t, X, Z)|_{X=1} = \phi_{s_k}(t, Z); \quad (2.38)$$

$$\phi_{s_k}(t, Z = L_k) = 0, \quad \phi_{s_{k-1}}(t, Z = L_{k-1}) = 0; \quad s = \overline{1, 2}, \quad k = \overline{N, 2}, \quad (2.39)$$

$$\phi_{s_1}(t, L_1) = 0, \quad \frac{\partial \phi_{s_1}}{\partial Z}(t, Z = 0) = 0, \quad (2.40)$$

Ми отримали розв'язок  $\phi_{s_k}$ ,  $\psi_{s_k}$  проблеми (2.35) - (2.40) з використанням операційного методу Гевісайда в [29].

Заміна в прямій задачі (2.9) - (2.15)  $D_{\text{inter}_{s_k}}, D_{\text{intra}_{s_k}}$ ,  $C_{s_k}(t, Z)$  та  $Q_{s_k}(t, X, Z)$  відповідними значеннями з кроком  $D_{\text{inter}_{s_k}} + \Delta D_{\text{inter}_{s_k}}$ ,  $D_{\text{intra}_{s_k}} + \Delta D_{\text{intra}_{s_k}}$ ,  $C_{s_k}(t, Z) + \Delta C_{s_k}(t, z)$  і  $Q_{s_k}(t, X, Z) + \Delta Q_{s_k}(t, X, Z)$ , віднімаючи перші рівняння від перетворених і нехтуючи малими умовами другого порядку, отримуємо основні рівняння задачі (2.9) - (2.15) з кроком  $\Delta C_{s_k}(t, Z)$  та  $\Delta Q_{s_k}(t, X, Z)$ ,  $s = \overline{1, 2}$  у формі оператора:

$$L w_{s_k}(t, X, Z) = X_{s_k}, \quad w_{s_k} \in (0, 1) \cup \Omega_{kt}, \quad k = \overline{1, N+1}, \quad (2.41)$$

Аналогічно запишемо систему основних рівнянь спряженої крайової задачі (2.35) - (2.40) в формулі:

$$L^* \Psi_{s_k}(t, X, Z) = E_{s_k}^n(t) \delta(Z - h_k), \quad \Psi_{s_k} \in (0, 1) \cup \Omega_{kt}, \quad k = \overline{1, N+1}, \quad (2.42)$$

де

$$\begin{aligned}
&= L = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial Z} \left( D_{\text{inter}_{sk}} \frac{\partial}{\partial Z} \right) & e_{\text{inter}_k} \frac{D_{\text{intra}_{sk}}}{R} \frac{\partial}{\partial X} \Big|_{X=1} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t} - \frac{D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) \end{bmatrix}, \\
&= L^* = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial Z} \left( D_{\text{inter}_{sk}} \frac{\partial}{\partial Z} \right) & e_{\text{inter}_k} \frac{D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \frac{\partial}{\partial X} \Big|_{X=1} \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t} + \frac{D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) \end{bmatrix}, \\
w_{s_k}(t, X, Z) &= \begin{bmatrix} \Delta C_{s_k}(t, Z) \\ \Delta Q_{s_k}(t, X, Z) \end{bmatrix}, \quad \Psi_{s_k}(t, X, Z) = \begin{bmatrix} \phi_{s_k}(t, Z) \\ \psi_{s_k}(t, X, Z) \end{bmatrix}. \\
X_{s_k}(t, X, Z) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial Z} \left( \Delta D_{\text{inter}_{sk}} \frac{\partial}{\partial Z} C_{s_k} \right) - e_{\text{inter}_k} \frac{\Delta D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_k}(t, X, Z) \Big|_{X=1} \\ \frac{\Delta D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) Q_{s_k}(t, X, Z) \end{bmatrix}, \quad (2.43)
\end{aligned}$$

де  $L^*$  - спряжений оператор з оператором Лапласа  $L$ .

Обчислений приріст функціоналу (2.17) (нехтуючи умовами другого порядку) має вигляд

$$\begin{aligned}
\Delta J_s(D_{\text{intra}_{sk}}, D_{\text{inter}_{sk}}) &= \int_0^T \int_{L_{k-1}}^{L_k} L^{-1} X_{s_{k,1}}(t, Z) \cdot E_{s_k}(t) \delta(Z - h_k) dZ dt + \\
&+ \int_0^T \int_{L_{k-1}}^{L_k} \int_0^1 L^{-1} X_{s_{k,2}}(t, X, Z) \cdot E_{s_k}(t) \delta(Z - h_k) X dX dZ dt
\end{aligned} \quad (2.44)$$

де  $w_{s_k} = L^{-1} X_{s_k}$ ,  $L^{-1}$  є оберненим оператором оператора  $L$ .

Визначивши скалярний добуток

$$(L w_{s_k}(t, X, Z), \Psi_{s_k}(t, X, Z)) = \begin{bmatrix} \iint_{\Omega_{kT}} L \Delta C_{s_k}(t, Z) \phi_{s_k}(t, Z) dZ dt \\ \iiint_{(0, R) \cup \Omega_{kT}} L \Delta Q_{s_k}(t, X, Z) \psi_{s_k}(t, X, Z) X dX dZ dt \end{bmatrix}^v \quad (2.45)$$

та з урахуванням тотожності Лагранжа [16, 21]

$$(L w_{s_k}(t, X, Z), \Psi_{s_k}(t, X, Z)) = (w_{s_k}(t, X, Z), L^* \Psi_{s_k}(t, X, Z))^v \quad (2.46)$$

і рівності:  $L^{-1*} [E_{s_k}(t) \delta(Z - h_k)] = \Psi_{s_k}$ , отримуємо приріст розширеного функціоналу, виражений розв'язком спряженої задачі (2.36) - (2.40) та вектором правої частини рівнянь (2.43):

$$\Delta J_s(D_{\text{inter}_{sk}}, D_{\text{intra}_{sk}}) = (\Psi_{s_k}(t, X, Z), X_{s_k}(t, X, Z)), \quad (2.47)$$

де  $\phi_{s_k}(t, Z)$  і  $\psi_{s_k}(t, X, Z)$  належать  $\bar{\Omega}_{kt}$  і  $[0,1] \cup \bar{\Omega}_{kt}$ , відповідно;  $L^{-1*}$  - спряжений оператор із оберненим оператором  $L^{-1}$ ,  $\Psi_{s_k}$  - розв'язок спряженої задачі (2.35) - (2.40).

Отримавши у рівнянні (2.47) компоненти  $X_{s_k}(t, X, Z)$  з урахуванням (2.43), отримуємо формулу, яка встановлює взаємозв'язок між прямою задачею (2.9) - (2.15) і спряженою задачею (2.35) - (2.40), що дає можливість отримати аналітичні вирази компонентів функціоналу градієнту:

$$\begin{aligned} \Delta J_s(D_{\text{intra}_{sk}}, D_{\text{inter}_{sk}}) = & \left( \phi_{s_k}(t, Z), \frac{\partial}{\partial Z} \left( \Delta D_{\text{inter}_{sk}} \frac{\partial}{\partial Z} C_{s_k} \right) - e_{\text{inter}_k} \frac{\Delta D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_k}(t, X, Z)_{X=1} \right) + \\ & + \left( \psi_{s_k}(t, X, Z), \frac{\Delta D_{\text{intra}_{sk}}}{R^2} \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) Q_{s_k}(t, X, Z) \right) \end{aligned} \quad (2.48)$$

Диференціюючи вираз (2.48), відповідно  $\Delta D_{\text{intra}_{sk}}$  і  $\Delta D_{\text{inter}_{sk}}$ , обчислюючи скалярні добутки відповідно до (2.45), отримуємо необхідні аналітичні вирази для градієнта функціоналу-нев'язки у внутрішньо- та міжкристалітному просторах відповідно:

$$\begin{aligned} \nabla J_{D_{\text{intra}_{sk}}}(t) = & - \frac{e_{\text{inter}_k}}{R^2} \int_{L_{k-1}}^{L_k} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_k}(t, 1, Z) \phi_{s_k}(t, Z) dZ + \\ & + \frac{1}{R^2} \int_{L_{k-1}}^{L_k} \int_0^1 \left( \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) Q_{s_k}(t, X, Z) \psi_{s_k}(t, X, Z) X dX dZ \end{aligned}, \quad (2.49)$$

$$\nabla J_{D_{\text{inter}_{sk}}}(t) = \int_{L_{k-1}}^{L_k} \frac{\partial^2 C_{s_k}(t, Z)}{\partial Z^2} \phi_{s_k}(t, Z) dZ. \quad (2.50)$$

Формули градієнтів  $\nabla J_{D_{\text{intra}_{sk}}}^n(t)$ ,  $\nabla J_{D_{\text{inter}_{sk}}}^n(t)$  включають аналітичні вирази розв'язків прямої задачі (2.9) - (2.14) та оберненої задачі (2.35) - (2.40). Вони забезпечують високу продуктивність обчислювального процесу, уникаючи великої кількості ітерацій внутрішнього циклу, використовуючи точні аналітичні методи [20].



## 2.7. Схема лінеаризації нелінійної моделі компететивної адсорбції. Система лінеаризованих задач та побудова розв'язків

Схема лінеаризації нелінійної задачі компететивної адсорбції (2.1) - (2.8) показана для того, щоб продемонструвати простоту реалізації для випадку двох дифундуючих компонентів ( $m = 2$ ) для ізотермічної адсорбції. Спрощена модель (2.1) - (2.8) для випадку  $m = 2$  перетворюється у форму:

$$\frac{\partial C_s(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_s}(t)}{l^2} \frac{\partial^2 C_s}{\partial Z^2} - e_{inter} \tilde{K}_s \frac{D_{intra_s}(t)}{R^2} \left( \frac{\partial Q_s}{\partial X} \right)_{X=1}, \quad (2.51)$$

$$\frac{\partial Q_s(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_s}(t)}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_s}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_s}{\partial X} \right), \quad s = \overline{1, 2} \quad (2.52)$$

з початковими умовами:

$$C_s(t=0, Z) = 0; \quad Q_s(t=0, X, Z) = 0; \quad X \in (0, 1), \quad s = \overline{1, 2}, \quad (2.53)$$

крайові умови для координати  $X$  нанопористої частинки:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_s(t, X=0, Z) = 0, \quad (2.54)$$

$$Q_1(t, X=1, Z) = \frac{K_1 C_1(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z)}, \quad (\text{рівняння рівноваги Ленгмюра})$$

$$Q_2(t, X=1, Z) = \frac{K_2 C_2(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z)}, \quad (2.55)$$

крайові умови для координати  $Z$ :

$$C_s(t, l) = 1, \quad \frac{\partial C_s}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \quad t \in (0, t^{total}); \quad (2.56)$$

$$K_1 = \frac{\bar{\theta}_1}{p_1(1 - \bar{\theta}_1 - \bar{\theta}_2)}, \quad K_2 = \frac{\bar{\theta}_2}{p_2(1 - \bar{\theta}_1 - \bar{\theta}_2)}, \quad p_1, p_2 \quad - \quad \text{константи рівноваги}$$

компететивної адсорбції та парціальні тиски в газовій фазі для 1-ї та 2-ї складових,  $\bar{\theta}_1, \bar{\theta}_2$  - внутрішньокристалітні простори, заповнені відповідними

адсорбованими молекулами. Вираз  $\varphi_s(C_1, C_2) = \frac{C_s(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z)}$

представлений рядом Тейлора [17, 26]:

$$\varphi_s(C_1, C_2) = \varphi_s(0,0) + \left( \frac{\partial \varphi_s}{\partial C_1} \Big|_{(0,0)} C_1 + \frac{\partial \varphi_s}{\partial C_2} \Big|_{(0,0)} C_2 \right) + \frac{1}{2!} \left( \begin{array}{cc} \frac{\partial^2 \varphi_s}{\partial C_1^2} \Big|_{(0,0)} C_1^2 + 2 \frac{\partial^2 \varphi_s}{\partial C_1 \partial C_2} \Big|_{(0,0)} C_1 C_2 + \frac{\partial^2 \varphi_s}{\partial C_2^2} \Big|_{(0,0)} C_2^2 \end{array} \right) + \dots \quad (2.57)$$

В результаті перетворень, обмежуючись рядом не вище другого порядку, отримуємо:

$$\frac{K_1 C_1(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z)} = K_1 C_1(t, Z) - \left( K_1^2 C_1^2(t, Z) + K_1 K_2 C_1(t, Z) C_2(t, Z) \right),$$

$$\frac{K_2 C_2(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z)} = K_2 C_2(t, Z) - \left( K_1 K_2 C_1^1(t, Z) C_2^1(t, Z) + K_2^2 C_2^2(t, Z) \right). \quad (2.58)$$

Підставляючи вираз (2.58) в рівняннях (2.55) нелінійної системи (2.50) - (2.56), отримуємо:

$$Q_1(t, X, Z)_{X=1} = K_1 C_1(t, Z) - \varepsilon \left( C_1^2(t, Z) + \frac{K_2}{K_1} C_1(t, Z) C_2(t, Z) \right),$$

$$Q_2(t, X, Z)_{X=1} = K_2 C_2(t, Z) - \varepsilon \left( \frac{K_2}{K_1} C_1(t, Z) C_2(t, Z) + \left( \frac{K_2}{K_1} \right)^2 C_2^2(t, Z) \right), \quad (2.59)$$

де  $\varepsilon = K_1^2 \ll 1$  - малий параметр.

Враховуючи наближені рівняння кінетики компететивної адсорбції (2.59), що містять малий параметр  $\varepsilon$ , шукаємо розв'язок задачі (2.51) - (2.56), використовуючи асимптотичний ряд з параметром  $\varepsilon$  у формулах [20, 26]:

$$C_s(t, Z) = C_{s_0}(t, Z) + \varepsilon C_{s_1}(t, Z) + \varepsilon^2 C_{s_2}(t, Z) + \dots, \quad (2.60)$$

$$Q_s(t, X, Z) = Q_{s_0}(t, X, Z) + \varepsilon Q_{s_1}(t, X, Z) + \varepsilon^2 Q_{s_2}(t, X, Z) + \dots, \quad s = \overline{1, 2}. \quad (2.61)$$

В результаті підстановки асимптотичного ряду (2.60) - (2.61) в рівняння нелінійної крайової задачі (2.51) - (2.56) з урахуванням рівняння (2.58) задача (2.51) - (2.56) буде розпаралелена на два типи лінеаризованих крайових задач [26]:

**Задача  $A_{s_0}$ ,  $s = \overline{1,2}$**  (нульове наближення з початковими та крайовими умовами початкової задачі): знайти обмежений розв'язок в області  $D = \{(t, X, Z) : t > 0, X \in (0,1), Z \in (0,1)\}$  системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial C_{s_0}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_s}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_0}}{\partial Z^2} - e_{inter} \tilde{K}_s \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial Q_{s_0}}{\partial X} \right)_{X=1}, \quad (2.62)$$

$$\frac{\partial Q_{s_0}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_{s_0}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_0}}{\partial X} \right), \quad (2.63)$$

з початковими умовами:

$$C_{s_0}(t=0, Z) = 0; \quad Q_{s_0}(t=0, X, Z) = 0; \quad X \in (0,1), s = \overline{1,2}, \quad (2.64)$$

крайовими умови для координати  $X$  нанопористої частинки (кристаліту):

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_{s_0}(t, X=0, Z) = 0 \quad (2.65)$$

$$Q_{s_0}(t, X=1, Z) = K_s C_{s_0}(t, Z), \quad s = \overline{1,2}, \quad (2.66)$$

крайовими умовами для координати  $Z$ :

$$C_{s_0}(t, 1) = 1, \quad \frac{\partial C_{s_0}}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \quad t \in (0, T); \quad (2.67)$$

**Задача  $A_n$ ;  $n = \overline{1, \infty}$**  ( $n$ -го наближення з нульовими початковими та крайовими умовами): побудувати в області  $D$  обмежений розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{\partial C_{s_n}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_s}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{s_n}}{\partial Z^2} - e_{inter} \tilde{K}_s \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial Q_{s_n}}{\partial X} \right)_{X=1} \quad (2.68)$$

$$\frac{\partial Q_{s_n}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_s}}{R^2} \left( \frac{\partial^2 Q_{s_n}}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_{s_n}}{\partial X} \right) \quad (2.69)$$

з початковими умовами:

$$C_{s_n}(t=0, Z) = 0; \quad Q_{s_n}(t=0, X, Z) = 0; \quad s = \overline{1,2}, \quad (2.70)$$

крайовими умовами для координати  $X$  нанопористої частинки:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_{s_n}(t, X=0, Z) = 0 \quad (2.71)$$

$$Q_{l_n}(t, X, Z)_{X=l} = K_l C_{l_n}(t, Z) - \sum_{\nu=0}^{n-1} C_{l_\nu}(t, Z) \left( C_{l, n-1-\nu}(t, Z) + \frac{K_2}{K_1} C_{2, n-1-\nu}(t, Z) \right),$$

$$Q_{2_n}(t, X, Z)_{X=l} = K_2 C_{2_n}(t, Z) - \sum_{\nu=0}^{n-1} C_{2_s}(t, Z) \left( \frac{K_2}{K_1} C_{l, n-1-\nu}(t, Z) + \left( \frac{K_2}{K_1} \right)^2 C_{2, n-1-\nu}(t, Z) \right), \quad (2.72)$$

крайові умови для координати  $Z$ :

$$C_{s_n}(t, l) = 0, \quad \frac{\partial C_{s_n}}{\partial Z}(t, Z=0) = 0, \quad t \in (0, t^{total}); \quad (2.73)$$

Задачі  $A_{s_0}$ ,  $s = \overline{1, 2}$  є лінійними щодо нульового наближення  $C_{s_0}$ ,  $Q_{s_0}$ ; Задачі  $A_{s_n}$ ;  $n = \overline{1, \infty}$  - лінійні щодо  $n$ -го наближення  $C_{s_n}$ ,  $Q_{s_n}$  і нелінійні відносно всіх попередніх  $n-1$  наближень  $C_{s_0}, \dots, C_{s_{n-1}}$ .

Як показано для двокомпонентної моделі адсорбції (2.51) - (2.56), запропонована нами методологія може бути легко реалізована і застосована до компететивної адсорбції будь-якої кількості газів.

## Номенклатура по розділу 2

$k = \overline{1, N+1}$  - номер шару,

$c$  - концентрація адсорбату в макропорах,

$c_\infty$  - рівноважна концентрація адсорбату в макропорах,

$C = c/c_\infty$  : безрозмірна концентрація адсорбату в макропорах,

$D_{inter}$  - коефіцієнт дифузії в макропор.,  $m^2/s$ ,

$D_{intra}$  - коефіцієнт дифузії в мікропор.,  $m^2/s$ ,

$\tilde{K}$  - константа адсорбційної рівноваги,

$l$  - товщина нанопористого шару,  $m$ ,

$\Delta l = l_k - l_{k-1}$ ;  $k = \overline{1, N+1}$ : товщина шару (всі шари мають однакову товщину),

$L$  - безрозмірна довжина шару ( $L = 1$ ),

$q$  - концентрація адсорбату в мікропорах,

$q_{\infty}$  - рівноважна концентрація адсорбату в мікропорах,  
 $Q = q/q_{\infty}$  - безрозмірна концентрація адсорбату в мікропорах,  
 $T$  - температура потоку газової фази, °K,  
 $\omega$  – загальна концентрація в макро- та мікропорах,  
 $u$  - швидкість потоку газової фази,  $m/s^2$ ,  
 $\Lambda$  - коефіцієнт теплової дифузії вздовж колон;  
 $h_g$  - теплоємність газу,  $kJ/(kg \cdot K)$ ,  
 $\mu$  – молекулярна маса адсорбату,  $kg/mol$ ,  
 $H$  - загальна теплоємність адсорбенту і газу,  $kJ/(kg \cdot K)$ ,  
 $\alpha_h$  - коефіцієнт тепловіддачі;  
 $R_{column}$  - радіус стовпця,  $m$ ,  
 $R_g$  - константа газу,  $kJ \cdot mol/(m^3 \cdot K)$ ,  
 $\Delta H$  - енергія активації,  $kJ/mol$ ;  
 $k_{0i}$  – коефіцієнт емпіричного рівноваги для адсорбату  $i$ , залежить від властивостей адсорбенту та дифундуючого адсорбатного компонента ( $k_{0i}$  дорівнює співвідношенню констант десорбції та швидкості адсорбції) ;  
 $x$  – відстань від кристалітного центру,  $m$ ,  
 $R$  – середній радіус кристаліту,  $m$  (вважаємо, що кристаліти сферичні),  
 $X = x/R$ : безрозмірна відстань від центру кристаліту,  
 $z$  – відстань від дна шару для математичного моделювання,  $m$  ,  
 $Z = z/l$  – безрозмірна відстань від дна шару,  
 $t$  – час,  $s$ ,  
 $\tau, \xi$  - змінні інтеграції,  
 $t^{total}$  - загальна тривалість компететивної адсорбції,  $min.$ ,  
 $L_k$  - безрозмірне положення  $k$ -го шару,  
 $h_k = (L_k - L_{k-1})/2$ ,  
 $\epsilon_{inter}$  - міжкристалітна пористість шару,  
 $e_{inter}$  - значення, що використовується в форм. (9),  
 $n$  - ітераційний номер ідентифікації,

$m$  - кількість адсорбованих компонентів,  
 $P$  - кількість поверхонь NMR- спостереження,  
 $s$  - індекс компонента адсорбату,  
 $i$  - показник NMR -поверхні спостереження.

### **Розділ 3. Високопродуктивні обчислювальні методи і технології моделювання нанопористих систем зі зворотними зв'язками для адсорбційного очищення газів**

Розглядається задача моделювання неізотермічної адсорбції та десорбції в нанопористих цеоліт-системах для нелінійної адсорбційної рівноваги типу Ленгмюра. Пропонуються високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та перетворення Лапласа з використанням схем декомпозиції та лінеаризації на основі підходу Ландау щодо розкладу в ряд функції рівноваги Ленгмюра в околі точки температури фазового переходу, що дозволяють ефективно розпаралелювання обчислень.

Впровадження сучасних кіберфізичних нанопористих систем поглинання шкідливих викидів вуглецевих сполук об'єктів енергетики і транспорту - ключ до вирішення світової проблеми глобального потепління, покращення стану здоров'я людини, довкілля та реалізації стратегії безпечної енергетики [6]. Якість наукомістких математичних моделей процесів адсорбції вуглецевих викидів об'єктів енергетики у нанопористих середовищах та високопродуктивних методів побудови їх розв'язків з урахуванням архітектури сучасних обчислювальних систем визначає ефективність технологічних рішень для нейтралізації та зменшення газових викидів, що стрімко зростає і сприяє глобальному потеплінню [7].

В цьому розділі, що є розвиненням робіт [15 - 20] окреслені теоретичні основи моделювання неізотермічної адсорбції в нанопористих системах з feedback-впливами для нелінійної ізотерми Ленгмюра, яка найповніше визначає механізм адсорбційної рівноваги для нанопористих цеоліт-систем. Для моделювання використовуються високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та інтегрального перетворення Лапласа з використанням підходу Ландау щодо розкладу в ряд неізотермічної функції рівноваги в околі точки температури фазового переходу та обґрунтування малого параметру, що дозволило отримувати

високошвидкісні аналітичні розв'язки, що підвищують якість розпаралелювання обчислювального процесу і моделювання в цілому.

### 3.1. Нелінійна математична модель неізотермічних адсорбції та десорбції на основі узагальненого рівняння адсорбційної рівноваги Ленгмюра

Вхідний потік газової суміші дифундує в макропорах (міжчастинковому просторі) каталітичного середовища і в нанопорах частинок (кристалітів) цеоліту. Загальна гіпотеза, прийнята в розробці моделі, полягає в тому, що адсорбційна взаємодія молекул з активними центрами адсорбції на поверхні фазового розділення в нанопорах кристалітів визначається на основі нелінійного рівняння адсорбційної рівноваги, отриманим Нобелівським лауреатом І. Ленгмюром з урахуванням наступних фізичних припущень [10, 11]:

1. Адсорбція локалізована і обумовлена силами, близькими до хімічних сил: силами дисперсії, взаємодія яких встановлюється законом Джона-Ленарда та електростатичними силами тяжіння та відштовхування, механізм дії яких описаний Ван-Дер-Ваальсом [10].

2. Адсорбція відбувається в активних центрах на поверхні адсорбенту та розподілена по всій внутрішній поверхні мікро- та нанопор. Кожний активний центр адсорбує лише одну молекулу адсорбату, а її молекулярний шар адсорбату формується на поверхні.

3. Адсорбовані молекули зберігаються активними центрами протягом певного часу, залежно від температури.

Виходячи з цього, функція адсорбційної рівноваги типу Ленгмюра, що описує фазовий адаптивний перехід із середовища потоку газу до нанопор шару адсорбції, буде визначатися нелінійною взаємодією, що встановлює зв'язок між

рівноважною концентрацією  $c_{eq}$

$$a(c_{eq}) = a_{full} \frac{b(T)c_{eq}}{1 + bc_{eq}}. \quad (3.1)$$

Тут  $\Delta H$  - енергія активації, кДж/моль;  $R$ - газова константа, кДж/моль/(м<sup>3</sup>);  $a_{full}$ ,  $0 < b_0 < 1$ ,  $b_0$  - емпіричні коефіцієнти, які залежать від властивостей



нанопористих адсорбентів та компонентів адсорбату ( $b_0$  рівний співвідношенню констант швидкості десорбції та адсорбції),  $a_{full}$  - концентрація адсорбату в нанопорах каталізатора з повним заповненням адсорбційних центрів, моль/г.

Енергія активації, що має фізичний зміст у цій задачі як теплота адсорбції, визначається як

$$\Delta H = \bar{\varphi} - (U_g - U_s) - RT, \quad (3.2)$$

де  $U_g - U_s$  - різниця між кінетичною енергією молекули адсорбату в газоподібних та адсорбованих станах залежно від природи адсорбованої фази,  $\bar{\varphi}$  - це величина потенціалу Джона-Ленарда, усереднена по об'єму пор адсорбенту [10], і є характеристикою нанопористого адсорбенту.

Крім того, оскільки  $U_g = \frac{i_g}{2}RT$ ;  $U_s = \frac{i_s}{2}RT$ , де  $i_g, i_s$  - число ступенів свободи молекул адсорбату у відповідній фазі. Тоді, використовуючи принцип рівномірного розподілу енергії в ступенях свободи, маємо

$$U_g - U_s = \frac{(i_g - i_s)}{2}RT. \quad (3.3)$$

Потенціал Ленарда-Джонса визначається як [10]:

$$\phi(r) = 4\tilde{\varepsilon} \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right],$$

де параметри  $\tilde{\varepsilon}$  і  $r$  залежать від природи молекул адсорбату.

Отримавши з (3.1) рівноважну концентраційну функцію  $c_{eq}$  щодо концентрації адсорбату в нанопорах  $a$ , отримаємо

$$c_{eq}(a) = \frac{1}{b(T)} \frac{a}{a_{full} - a} \quad (3.4)$$

Остаточно кінетика неізотермічної адсорбції та десорбції в нанопористих цеолітах з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги та даних фізичних обґрунтувань описується наступною системою нелінійних рівнянь в частинних похідних [17, 20]:

$$\frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (3.5)$$

$$-H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta \left( c - \frac{1}{b_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{\text{full}} - a} \right). \quad (3.7)$$

Початкові умови:

$$\begin{array}{ll} \text{a) адсорбція:} & \text{b) десорбція:} \\ c(t, z)|_{t=0} = 0, & c(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \end{array} \quad (3.8)$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad T(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad (3.9)$$

Крайові умови:

$$\begin{array}{ll} \text{a) адсорбція:} & \text{b) десорбція:} \\ c(t, z)|_{z=0} = c_{in}, & c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \end{array} \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (3.11)$$

$$T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (3.12)$$

**Схема лінеаризації нелінійної моделі.** Виконаємо деякі розклади в ряд елементів нелінійної компоненти  $\frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{\text{full}} - a}$  диференціального рівняння

(3.7). Розклавши згідно підходу Ландау вираз  $\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)$  в ряд Тейлора в околі точки температури фазового переходу  $T_{eq}$ , що відповідає положенню рівноваги «адсорбат-мікропори адсорбенту» стадії десорбції, отримуємо [27]

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right) &= \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) - \frac{\Delta H}{R} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \frac{1}{T_{eq}^2} (T - T_{eq}) + \\ &+ \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta H}{R}\right)^2 \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \left(\frac{1}{T_{eq}^4} + \frac{R}{2\Delta H} \frac{1}{T_{4eq}^3}\right) (T - T_{eq})^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.13)$$

З урахуванням того, що величина  $\frac{a}{a_{full}} < 1$ , вираз  $\frac{a/a_{full}}{1 - \frac{a}{a_{full}}}$  розкладаємо в ряд

Маклорена [28]:

$$\frac{a/a_{full}}{1 - \frac{a}{a_{full}}} = \frac{1}{1 - \frac{a}{a_{full}}} - 1 = \frac{a}{a_{full}} + \left(\frac{a}{a_{full}}\right)^2 + \dots + \left(\frac{a}{a_{full}}\right)^n + \dots \quad (3.14)$$

Нехтуючи членами не менше другого порядку у формулах (3.13), (3.14),

вираз  $\frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a}$  набуде вигляду [17]:

$$\begin{aligned} c_{eq}(a) &= \frac{1}{b(T)} \frac{a/a_{full}}{1 - a/a_{full}} \approx \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \frac{1 - \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{eq}^2} (T - T_{eq})}{k'_0 a_{full}} a + \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \frac{1 - \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{eq}^2} (T - T_{eq})}{k'_0 (a_{full})^2} a^2 = \\ &= \frac{1 + \frac{\Delta H}{RT_{eq}}}{k'_0 a_{full}} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) a + \frac{1 + \frac{\Delta H}{RT_{eq}}}{k'_0 (a_{full})^2} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) a^2 - \frac{1}{k'_0 a_{full}} \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{eq}^2} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) a T - \\ &\quad - \frac{1}{k'_0 (a_{full})^2} \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{eq}^2} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) T a^2 \approx \gamma a(t, z) + \varepsilon a^2(t, z) - \varepsilon \theta \varepsilon a(t, z) T(t, z), \end{aligned} \quad (3.15)$$

де  $\gamma = \frac{1 + \frac{\Delta H}{RT_{eq}}}{k'_0 a_{full}} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right)$  - константа адсорбції, що описує лінійну компоненту

функції адсорбційної рівноваги  $c_{eq}(a)$  (згідно закону Генрі),

$\varepsilon = \frac{1 + \frac{\Delta H}{RT_{eq}}}{k'_0 (a_{full})^2} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right)$  - малий параметр, що враховує нелінійну компоненту

неізотермічної адсорбції,  $\theta = \frac{a_{full}}{1 + \frac{\Delta H}{R}} \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{eq}^2}$ ,  $Q = \frac{\Delta H}{M_{ads}}$  - теплота адсорбції.

Підставляючи розкладений вираз (3.15) замість залежності  $c_{eq}(a)$  в третьому рівнянні системи (3.5) - (3.7), отримаємо:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(c - \gamma a(z, t) - \varepsilon a^2(z, t)(a(t, z) - \theta T(t, z))) \quad (3.16)$$

### 3.2. Методика побудови аналітичних розв'язків системи неоднорідних крайових задач адсорбції/десорбції

Лінеаризована система задач з малим параметром. Задача (3.5) - (3.12) з урахуванням апроксимаційного кінетичного рівняння фазового перетворення (3.16), що містить малий параметр  $\varepsilon$ , є змішаною крайовою задачею для нелінійної системи диференціальних рівнянь в частинних похідних другого порядку. Розв'язок задачі (3.5) - (3.12) шукаємо за допомогою асимптотичного розкладу за малим параметром  $\varepsilon$  у вигляді наступних степеневих рядів [18]:

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\ T(t, z) &= T_0(t, z) + \varepsilon T_1(t, z) + \varepsilon^2 T_2(t, z) + \dots, \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots \end{aligned} \quad (3.17)$$

В результаті підстановки асимптотичних сум (3.17) у рівняння (3.5) - (3.12), вихідна нелінійна крайова задача (3.5) - (3.12) розпаралелюється на два типи лінеаризованих крайових задач [30, 62]:

**Задача  $A_0$**  (нульове наближення з початковими та крайовими умовами вихідної нелінійної задачі): знайти розв'язок в області  $D = \{(t, z): t > 0, z \in (0, \infty)\}$  системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial c_0(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_0(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial x} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (3.18)$$

$$-H \frac{\partial T_0(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_0}{\partial z} - Q \frac{\partial a_0}{\partial t} - X^2 T_0 + \Lambda \frac{\partial^2 T_0}{\partial z^2} = 0, \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0). \quad (3.20)$$

Початкові умови:

$$\begin{array}{ll} \text{a) адсорбція:} & \text{b) десорбція:} \\ c_0(t, z)|_{t=0} = 0, & c_0(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \end{array} \quad (3.21)$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad (3.22)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_m, \quad c_0(t, z)|_{z=0} = c_m(t), \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (3.24)$$

$$T_0(t, z)|_{z=0} = T_m, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T_0(t, z)|_{z=0} = T_m(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (3.25)$$

**Задача**  $A_n; n = \overline{1, \infty}$  ( $n$ -го наближення з нульовими початковими та крайовими умовами): побудувати в області  $D$  обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_n(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_n(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_n}{\partial z} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2}, \quad (3.26)$$

$$-H \frac{\partial T_n(t, z)}{\partial t} - u h_s \frac{\partial T_n}{\partial z} - Q \frac{\partial a_n}{\partial t} - X^2 T_n + \Lambda \frac{\partial^2 T_n}{\partial z^2} = 0, \quad (3.27)$$

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = \beta \left( c_n - \gamma a_n - \sum_{i=0}^{n-1} \left( a_i(t, z) \left( a_{n-1-i}(t, z) - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i}(t, z) \right) \right) \right), \quad (3.28)$$

Задача  $A_0$  є лінійною щодо нульового наближення  $c_0, a_0, T_0$ . Задача  $A_n; n = \overline{1, \infty}$  лінійна щодо  $n$ -го наближення та нелінійна щодо всіх попередніх  $i$  наближень,  $i = \overline{0, n-1}$ .

Побудуємо аналітичні розв'язки задач  $A_0$  та  $A_n; n = \overline{1, \infty}$  використовуючи операційний метод Гевісайда [29, 30]. Застосувавши по часовій змінній  $t$  до задач (3.18) - (3.25) та (3.26) - (3.28) інтегральний оператор прямого перетворення Лапласа, одержимо наступну систему крайових задач в зображеннях за Лапласом [29]:

**Задача**  $A_0^*$ : побудувати в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  обмежений розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{d^2 c_0^*(p, z)}{dz^2} - u_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q_1^2(p) c_0^* = -F_{c_0}^*(p), \quad (3.29)$$

$$\frac{d^2 T_0^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_0^*}{dz} - q_2^2(p) T_0^* = -F_{T_0}^*(p), \quad (3.30)$$

$$a_0^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} c_0^*(p, z). \quad (3.31)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

б) десорбція:

$$c_0^*(p, z)|_{z=0} = c_{in}^*(p), \quad \frac{d}{dz} c_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad c_0^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in}, \quad (3.33)$$

$$T_0^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T_0^*(p, z)|_{z=0} = T_{in}^*(p). \quad (3.34)$$

**Задача**  $A_n^*$ ;  $n = \overline{1, \infty}$ : побудувати в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  обмежений розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{d^2 c_n^*}{dz^2} - u_1 \frac{dc_n^*}{dz} - q_1^2(p) c_n^* = -F_{c_n}^*(p, z), \quad (3.35)$$

$$\frac{d^2 T_n^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_n^*}{dz} - q_2^2(p) T_n^* = -F_{T_n}^*(p, z), \quad (3.36)$$

$$a_n^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} \left( c_n^* - \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right), \quad (3.37)$$

де  $u_1 = \frac{u}{D_{inter}}$ ,  $q_1^2(p) = \frac{p(p + \beta(\gamma + 1))}{D_{inter}(p + \beta\gamma)}$ ,  $q_2^2(p) = \frac{Hp + X^2}{\Lambda}$ ,

$$F_{c_0}^* = \frac{c_0^0}{D_{inter}}, \quad F_{T_0}^*(p, z) = \frac{1}{\Lambda} \left( HT_0^0 - Q\beta \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) c_0^*(p, z) \right),$$

$$F_{c_n}^*(p, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z),$$

$$F_{T_n}^*(p, z) = -\frac{Q\beta}{\Lambda} \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left( c_n^*(p, z) - \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z) \right),$$

$$c^*(p, z) = \int_0^{\infty} c(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[c], \quad a^*(p, z) = \int_0^{\infty} a(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[a],$$

$$T^*(p, z) = \int_0^{\infty} T(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[T].$$

**Розв'язок неоднорідної крайової задачі  $A_0$ .** Побудуємо розв'язок неоднорідної крайової задачі  $A_0^*$  (використовуючи метод Коші) [29, 30]:

$$c_0^*(p, z) = (pc_{in}^*(p))e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left( \frac{1}{p} + \frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right) + c_0^0 \frac{\beta}{(p+\beta(\gamma+1))} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} e^{\frac{u_1}{2}z} \quad (3.38)$$

$$T_0^*(p, z) = pT_{in}^*(p) \frac{e^{\left(\frac{u_2}{2} - \omega_2(p)\right)z}}{p} + \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left( \frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right) F_{T_0}^*(p, z, \xi) d\xi \quad (3.39)$$

де  $\omega_1(p) = \left( \frac{u_1^2}{4} + q_1^2(p) \right)^{1/2}$ ,  $\omega_2(p) = \left( \frac{u_2^2}{4} + q_2^2(p) \right)^{1/2}$ ,  $\text{Re}\omega_1 > 0$ ,  $\text{Re}\omega_2 > 0$ .

Застосовуючи інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа

$$L^{-1} \left[ \dots^*(p, z) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \dots^*(p, z) e^{pt} \quad \text{до формул (3.38), (3.39) отримуємо на основі}$$

[29] їх оригінали, що формують аналітичний розв'язок задачі  $A_0$  нульового наближення: залежність концентрації адсорбату в газовій фазі (міжчастинковий простір) температури та концентрації адсорбату в частинках нанопористого цеоліту вздовж координати шару та в часі для циклів адсорбції та десорбції

$$c_0(t, z) = c_{in}(0) e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \Phi_c^0(t, z) + e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \int_0^t \frac{d}{d\tau} c_{in}(\tau) \Phi_c^0(t-\tau, z) d\tau + c_0^0 \frac{\gamma}{1+\gamma} \left( 1 + \frac{1}{\gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \Phi_c^0(t, z) \right) + \beta c_0^0 e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-s)} \Phi_c^0(\tau, z) d\tau \quad (3.40)$$

$$T_0(t, z) = T_{in}(0) \Phi_T^0(t, z) + \int_0^t \frac{d}{d\tau} T_{in}(\tau) \Phi_T^0(t-\tau, z) + \frac{1}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[ H\Gamma_0^0 H_T(t-\tau, z, \xi) - Q\beta \left( H_T(t-\tau, z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} H_T(\tau-s, z, \xi) ds \right) c_0^*(p, \xi) \right] d\xi d\tau \quad (3.41)$$

$$a_0(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-\tau)} c_0(\tau, z) d\tau \quad (3.42)$$

Тут:

$$\Phi_c^0(t, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi e^{-\varphi_1(v)z} \frac{\sin(vt - z\varphi_2(v)^2)}{v} dv + e^{\frac{u}{2D_{inter}}z},$$

$$\Phi_c(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi_1(\nu) \cos(\nu t - \varphi_2(\nu)z) + \varphi_2(\nu) \sin(\nu t - \varphi_2(\nu)z)}{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu))^{1/2}} d\nu.$$

$$\Phi_T^0(t, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\phi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z},$$

$$\Phi_T(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\phi_1(\nu) \cos(\nu t - \phi_2(\nu)z) + \phi_2(\nu) \sin(\nu t - \phi_2(\nu)z)}{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2}} d\nu,$$

$$\text{де } \varphi_{1,2}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_1^2(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \quad \Gamma_1(\nu) = \frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2} + \frac{\nu^2 \beta}{D_{\text{inter}}^2 (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)},$$

$$\Gamma_2(\nu) = \frac{\nu^3 + \nu \beta^2 (\gamma + 1) \gamma}{D_{\text{inter}} (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)}, \quad \phi_{1,2}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_{T_1}^2(\nu)}{2} \right]^{1/2},$$

$$\Gamma_{T_1}(\nu) = \frac{u^2 + 4\Lambda X^2}{4\Lambda^2}, \quad \Gamma_{T_2}(\nu) = \frac{H\nu}{\Lambda}.$$

При переході до оригіналу Лапласа в формулі (3.41) перетворення першої компоненти здійснюється з використанням інтеграла Дюамеля [29, 30], де  $H_T(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_2}{2}(z-\xi)} (\Phi_T(\tau, |z-\xi|) - \Phi_T(\tau, z+\xi))$ .

**Розв'язок неоднорідної крайової задачі**  $A_n; n = \overline{1, \infty}$ . Розв'язки задач  $A_n^*; n = \overline{1, \infty}$  є функціями [12]:

$$c_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left( \frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) F_{c_n}^*(p, \xi) d\xi, \quad (3.43)$$

$$T_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left( \frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) F_{T_n}^*(p, \xi) d\xi, \quad (3.44)$$

$$a_n^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} \left[ c_n^*(p, z) - \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z) \right] \quad (3.45)$$

Підставляючи значення  $F_{c_n}^*(p, \xi)$  і  $F_{T_n}^*(p, \xi)$  відповідно в рівняння (3.43), (3.44) і застосовуючи інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа до формул (3.43) - (3.45), отримаємо на основі [17, 29] їх оригінали, які формують



аналітичний розв'язок задачі  $A_n; n = \overline{1, \infty}$ , що описує часово-просторові розподіли  $n$ -го наближення адсорбційних концентрацій у газовій фазі  $c_n(t, z)$ , температури  $T_n(t, z)$  та адсорбції (концентрація адсорбату в нанопорах частинок)  $a_n(t, z)$ :

$$c_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[ H_c(t - \tau, z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} H_c(s, z, \xi) ds \right] \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (\tau, \xi) d\xi d\tau \quad (3.46)$$

$$T_n(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[ H_T(t - \tau, z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} H_T(s, z, \xi) ds \right] \left[ \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) (s, \xi) - c_n(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau \quad (3.47)$$

$$a_n(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\beta\gamma(t-\tau)} \left( c_n(\tau, z) - \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) (\tau, z) \right) d\tau, \quad (3.48)$$

де  $H_c(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_1}{2}(z-\xi)} (\Phi_c(\tau, |z - \xi|) - \Phi_c(\tau, z + \xi))$ .

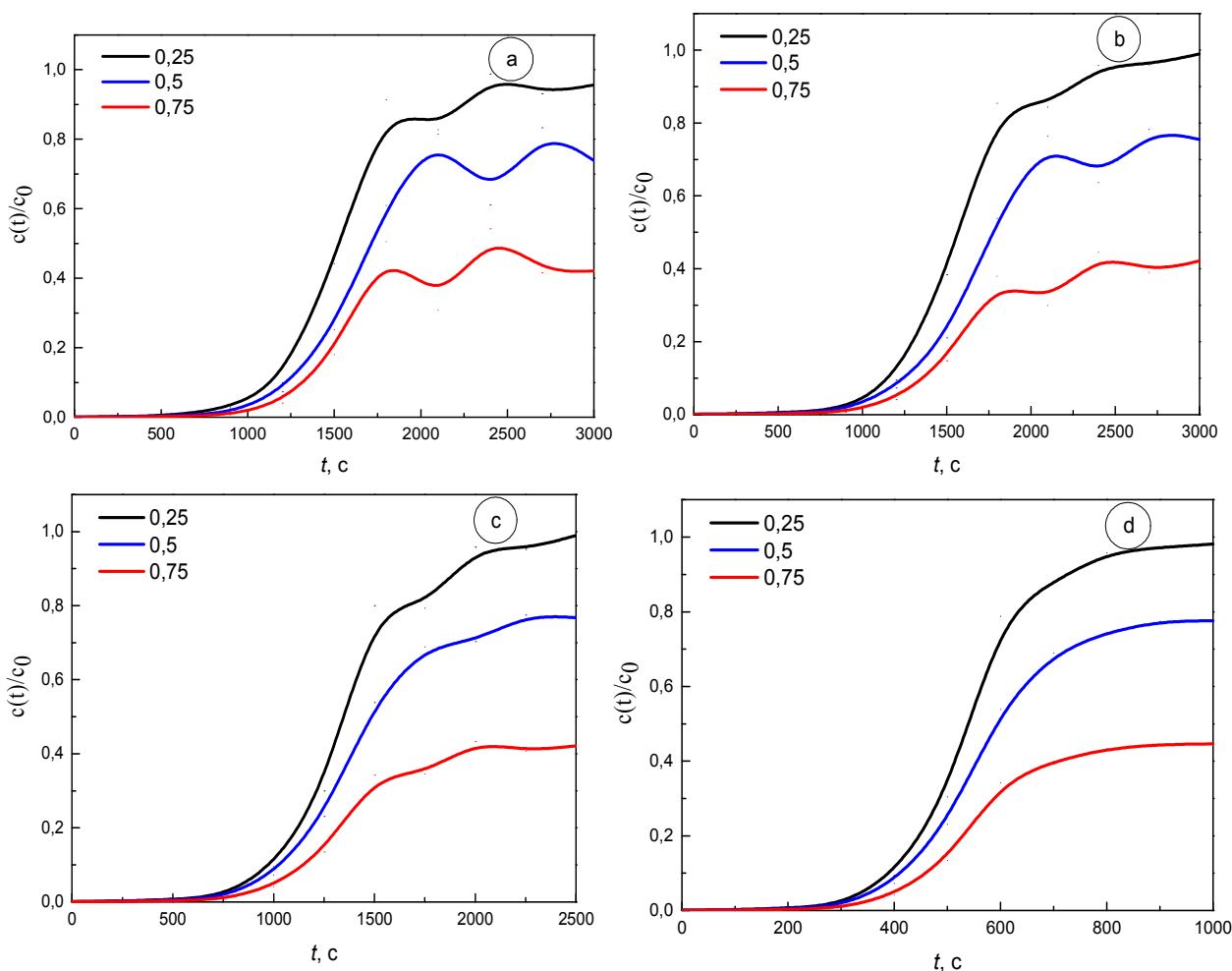
### 3.3 Комп'ютерне моделювання. Аналіз розподілів концентрації адсорбтиву в газовій фазі і нанопорах цеоліту та температур

Метою комп'ютерного моделювання було вивчення можливостей запропонованої моделі, для її подальшого використання в технологіях очищення викидів вуглецю в атмосферу енергетичними та транспортними об'єктами (пропан, CO<sub>2</sub> та інші продукти згоряння). Сьогодні це один із ключових способів вирішення проблеми глобального потепління та створення безпечної енергетичної стратегії [6].

В якості адсорбату було обрано пропан, обсяг якого охоплює близько 30% загального потоку газу, що виходить з двигуна автомобіля [7]. Використовуючи розроблену теорію, проведено моделювання та обчислення концентраційних залежностей неізотермічних кривих адсорбції та десорбції в нанопорошкових каталітичних пластах. Розрахунки проводились для експериментального зразка [10]. Геометричні розміри зразка: довжина -  $l = 1,5 \cdot 10^{-2}$  м, радіус  $R = 0,45 \cdot 10^{-2}$  м. Фізичні параметри цеоліту взяті з [10, 17, 31].

З використанням розвиненої в даному розділі теорії, застосовуючи залежності (3.40), (3.46) виконувались розрахунки концентрацій адсорбату у газоподібній фазі. На рис. 3.1, а, б, с, д приведено залежності розрахованих величин концентрації  $c = c(t, z)$  від часу для фіксованих значень геометричних

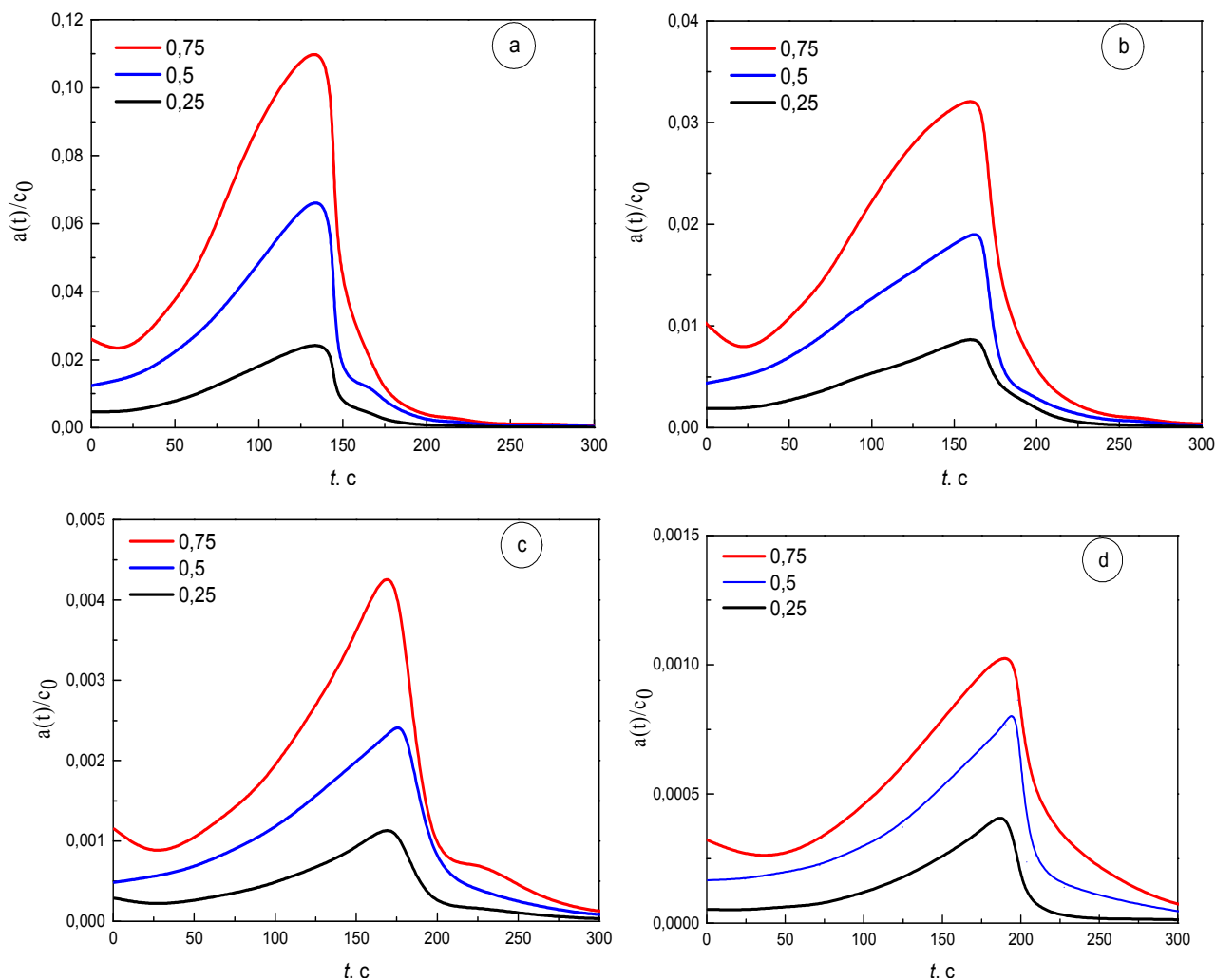
розмірів досліджуваного зразка та фіксованих значень температури 20 °С, 50 °С, 100 °С, 300 °С, за якої відбуваються адсорбційні процеси.



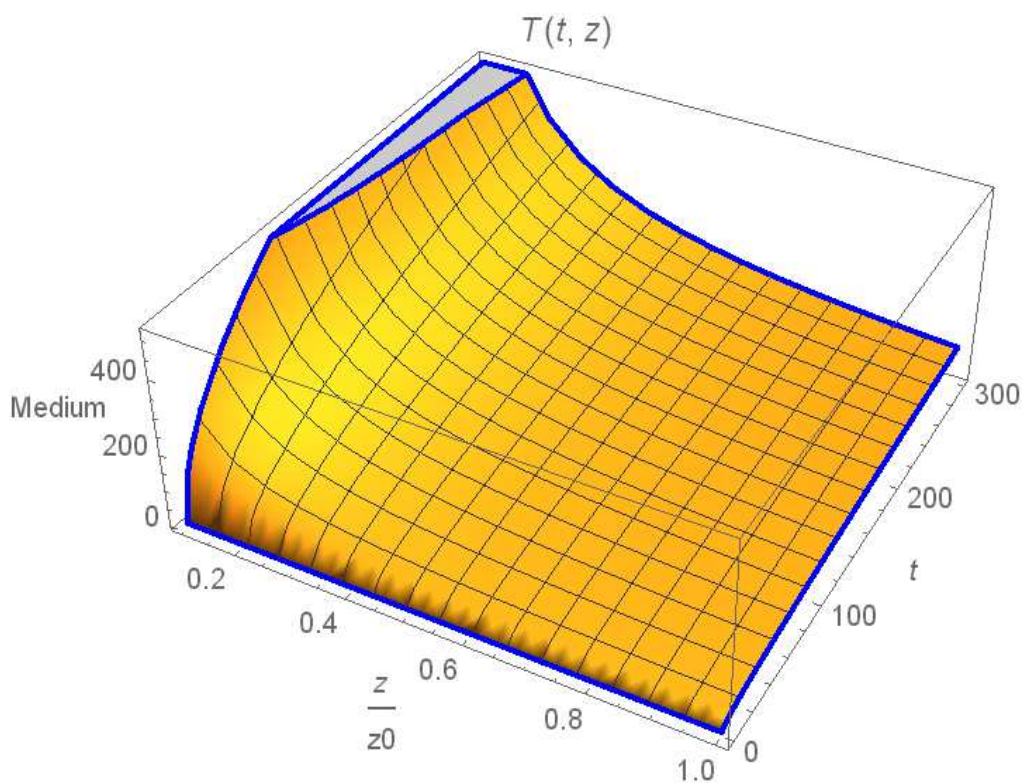
**Рисунок 3.1.** Залежності концентрації адсорбату в газовій фазі  $c=c(t,z)$  за фіксованими значеннями  $z(z/z_0=0,25; 0,5; 0,75)$ , розрахованими при температурі 20 °С (а), 50 °С (б), 100 °С (с), 300 °С (д)

Як видно з розрахованих залежностей від часу  $t$ , їх загальний характер є якісно однаковим: для кожного з значень  $z/z_0$  значення концентрації адсорбату  $c(t)/c_0$  зростають. При цьому на графіках рис. 3.1 а, б, с можна спостерігати незначне зменшення концентрації адсорбату, а далі його концентрація збільшується, виходячи на насичення. Слід зауважити, що з ростом температури виявлений ефект стає все менш вираженим. Поява цього ефекту пов'язана з тим, що при малій температурі молекули відштовхуються одна від одної, як це видно зі співвідношення Джона-Ленарда, що спричиняє часткове вивільнення нано-порами адсорбату частини адсорбованих молекул. З ростом

температури сили відштовхування між молекулами слабшають, і згаданий ефект стає слабовираженим. Також слід зауважити, що швидкість росту концентрації адсорбату у газовій фазі сильно залежить від температури: вона швидко зростає з її ростом.



**Рисунок 3.2.** Залежність концентрації в порах адсорбенту  $a=a(t,z)$  при фіксованих значеннях  $z$  ( $z/z_0=0,25; 0,5; 0,75$ ), розрахованих при температурі 20 °C (а), 50 °C (б), 100 °C (в), 300 °C (г)



**Рисунок 3.3.** Просторова залежність температури всередині зразка  $T = T(t, z)$  від часу та координати товщини зразка

Також, як видно з рис. 3.3 на процес істотно впливає зростання температури усередині досліджуваного зразка. Співставляючи графіки рис. 3.2 a, b, c, d і рис. 3.3, видно, що процес поглинання нанопорами адсорбенту відбувається в проміжку від 50 с до 200 с, при цьому температура всередині досліджуваного зразка змінюється в середньому від 100 °С до 350 °С.

**Висновки до розділу 3.** Розроблені високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання неізотермічних адсорбції і десорбції в нанопористих каталізаторах для класів нелінійних ізотерм адсорбції газів в нанопористих цеоліт-системах. Обґрунтовані і розвинуті підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції в рамках полімолекулярної теорії адсорбційної рівноваги Ленгмюра, на випадки неізотермічної циклічної адсорбції-десорбції шляхом включення в них компонентів впливу температури середовища та енергії активації. На їх основі побудовані нові нелінійні математичні моделі, що включають балансові рівняння адсорбції/десорбції з урахуванням взаємодії нано- і макропотоків,

дисперсійних сил Ленарда-Джонса, швидкості і температури газового потоку. Реалізовані ефективні схеми лінеаризації нелінійних моделей на основі підходу Ландау щодо розкладу в ряд функції рівноваги в околі точки температури фазового переходу та малого параметру. Побудовані високошвидкісні аналітичні та числові розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда, здійснена їх алгоритмічна і програмна реалізація, що дозволило здійснити ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів та підвищити швидкодію обчислень в цілому.

## **Розділ 4. Високопродуктивні алгоритми розв'язування систем нелінійних рівнянь на суперкомп'ютерах з паралельною організацією обчислень**

При чисельному моделюванні природних явищ, поведінки об'єктів під впливом дії навколишнього середовища, проектуванні будівель та механізмів тощо часто виникають, наприклад, при використанні тривимірних моделей, розрахункові (дискретні) задачі з надвеликою кількістю (яка може перевищувати  $10^7$ ) рівнянь, в тому числі нелінійних. Причому дані (матриці Якобі) таких нелінійних систем (СНР) мають розріджену структуру, наприклад, блочно-тридіагональну або блочно-п'ятидіагональну. Тобто кількість ненульових елементів значно менша (приблизно дорівнює  $kn$ , де  $n$  – порядок матриці, а  $k \ll n$ ) загальної кількості елементів матриці.

Зростання параметрів задач, що розв'язуються, розрахунок на комп'ютерах більш повних моделей об'єктів, процесів, явищ вимагає відповідного зростання продуктивності комп'ютерів. В даний час зростання продуктивності обчислень досягається за рахунок розпаралелювання, яке базується на використанні комп'ютерів з багатьма процесорними пристроями, зокрема з багатоядерними процесорами. В цих комп'ютерах, як правило, реалізується MIMD-архітектура (архітектура з множинним потоком команд і даних). В останні роки також набули поширення гібридні обчислювальні системи, в яких використовуються співпроцесори, наприклад, графічні процесори (GPU), для прискорення обчислень при виконанні великих обсягів однорідних арифметичних операцій. На таких співпроцесорах-прискорювачах, як правило, реалізується SIMD-архітектура паралельних обчислень. Такі комп'ютери гібридної архітектури вже зайняли провідні позиції в світовому рейтингу найпродуктивніших комп'ютерів TOP500 [32].

Розглянемо розв'язування систем нелінійних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури та комп'ютерах з багатоядерними процесорами Intel Xeon

Phi серії x200, зокрема з використанням багаторівневої моделі паралельних обчислень.

#### 4.1. Багаторівнева модель паралельних обчислень

Архітектура сучасних високопродуктивних комп'ютерів надає можливість використовувати багаторівневу модель паралельних обчислень – багаторівневий паралелізм:

– верхній рівень (MIMD-модель) – паралелізм процесів (process level parallelism, PLP) – процеси паралельно виконують макрооперації (підзадачі), наприклад, множення матричних блоків, використовуючи як розподілену між ними, так і спільну пам'ять і синхронізуючи обчислення та обміни даними;

– другий рівень (SIMD-модель) – паралелізм потоків (thread level parallelism, TLP) – розпаралелення виконання кожної з макрооперацій, використовуючи декілька потоків і спільну пам'ять;

– третій рівень (векторизація) паралелізм обробки даних векторними процесорними пристроями (data level parallelism, DLP) – паралельно виконуються операції з векторами, наприклад, додавання векторів.

На верхньому рівні використовуються (як правило) засоби MPI, на другому – засоби (директиви) OpenMP (Open Multi-Processing) або програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL. Третій рівень – автоматичне включення паралелізму при компіляції програми.

**Постановка задачі.** В області  $D = \{a_i \leq x_i \leq b_i, i = 1, 2, \dots, n\}$  знайти  $n$ -вимірний вектор  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \in D$ , який задовольняє системі  $n$  нелінійних рівнянь

$$F(x) = 0, \quad (4.1)$$

де  $F(x) = (F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x))^T$  –  $n$ -вимірна вектор-функція, причому  $F(x)$  є наближенням до точної вектор-функції  $\Phi(x)$  і для цих функцій виконується нерівність  $\|F(x) - \Phi(x)\| \leq \delta$  для будь-якого  $x \in D$ . Для розв'язування задачі (4.1) задаються початкове наближення  $x^{(0)} \in D$  і необхідна точність  $\varepsilon$  отримання наближення до розв'язку системи.

В прикладних галузях, зокрема в розрахунку напружено-деформованого стану конструкцій складних енергетичних систем і об'єктів (див., напр., [33]) використовують наступну постановку нелінійної задачі. Математично статична нелінійна задача розрахунку міцності конструкцій цих об'єктів, використовуючи принцип можливих переміщень, може бути поставлена у нескінченновимірному функціональному просторі можливих переміщень  $U_0$  у вигляді варіаційної задачі: знайти вектор-функцію  $u \in U_0$ , яка для будь-якої вектор-функції  $v \in U_0$  задовольняє відповідній інтегральній тотожності

$$a(u, v) = l(f, v); \quad (4.2)$$

де нелінійний по  $u$  і лінійний по  $v$  функціонал  $a(u, v)$  пропорційний потенційній енергії деформації, а лінійний по  $v$  функціонал  $l(f, v)$  пропорційний роботі прикладених зусиль  $f$  при навантаженні.

Розв'язки нелінійних задач (4.2) знаходяться одним з проєкційно-варіаційних методів, переважно методом скінченних елементів (МСЕ). Наближені розв'язки МСЕ шукаються у скінченновимірному ( $n$ -вимірному) підпросторі  $U_0^h \subset U_0$ . Вектор-функції з підпростору  $U_0^h$  є кусково-поліноміальними і можуть бути представлені у вигляді лінійної комбінації базисних вектор-функцій  $u_h(\chi) = \sum_{j=1}^n x_j \varphi_j(\chi)$ , де  $\varphi_j$  ( $j = 1, 2, \dots, n$ ) – згаданий вище кусково-поліноміальний базис  $U_0^h$ . Підставивши в (4.2) вектор-функції з підпростору  $U_0^h$  отримуємо систему нелінійних (відносно  $x_j$ ) рівнянь

$$a(u_h, \varphi_k) = l(f, \varphi_k), \quad k = 1, 2, \dots, n. \quad (4.3)$$

**Розв'язування СНР** (4.3) базується, як правило, на лінеаризації нелінійних рівнянь – пошук розв'язків реалізується через розв'язування послідовності лінійних систем з наближеними матрицями Якобі. В багатьох прикладних застосуваннях для цього використовують похідну функціонала  $a(u, v)$

$$a'(u, v, w) = \left. \frac{d}{d\tau} a(u + \tau w, v) \right|_{\tau=0}, \quad w \in U_0 \quad (4.4)$$



для обчислення наближень матриці Якобі системи (4.3). Тоді матрицю лінеаризованої системи

$$Ax = b \quad (4.5)$$

можна обчислити за формулою

$$\{a_{ij}\}_{i,j=1}^n = \{a'(u_h, \varphi_i, \varphi_j)\}_{i,j=1}^n, \quad (4.6)$$

розуміючи під  $u_h$  наближений розв'язок, який отримано на попередньому кроці (ітерації). Матрицю  $\{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$  можна також отримати шляхом диференціювання (згідно (4.4))  $a(u_h, \varphi_k)$  по  $x_i$  з (4.3).

В багатьох прикладних застосуваннях реалізуються ітераційні методи розв'язування СНР (4.1) або (4.3), які базуються (див., напр., [34, 35]) тою чи іншою мірою на класичному методі Ньютона, що має квадратичну швидкість збіжності. При цьому на кожній ітерації розв'язується СЛАР з матрицею Якобі системи або з деякою наближеною до неї матрицею, а елементи матриць та компоненти векторів правих частин цих СЛАР обчислюються, використовуючи розв'язки отримані на попередній ітерації.

Позначимо  $H(x) = \left\{ \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right\}_{i,j=1}^n$  – матриця Якобі системи (4.1) або (4.3),  $B(x)$

– деяке наближення до  $H(x)$ . Якщо для обчислення наближеної матриці Якобі системи (4.3) часто використовують похідну функціонала  $a(u, v)$  (4.4), то

$$a'(u_h, v_h, w_h) = H(x)u \quad (\text{якщо } u = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T, \quad u_h = \sum_{j=1}^n x_j \varphi_j, \quad w_h = \sum_{j=1}^n y_j \varphi_j,$$

$$v_h = \sum_{j=1}^n \varphi_j).$$

Ітераційний процес збігається, якщо виконується оцінка  $\|x^{(k)} - x\| \leq c \|x^{(k-1)} - x\|^\alpha$ , де  $c$  – деяка величина, обмежена зверху;  $\alpha$  – порядок збіжності методу. Якщо  $\alpha = 2$ , то досягається квадратична швидкість збіжності ітераційного процесу, якщо  $1 < \alpha < 2$ , то ітераційний процес збігається надлінійно.

Ітераційний процес методу Ньютона при заданому початковому наближенні записується так ( $k = 1, 2, \dots$  – номер ітерації,  $F^{(k)} \equiv F(x^{(k)})$  і  $B^{(k)} \equiv H^{(k)} \equiv H(x^{(k)})$ )

$$B^{(k-1)}w^{(k)} = -F^{(k-1)}, \quad (4.7)$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + w^{(k)}. \quad (4.8)$$

В багатьох випадках для розв'язування СНР використовують модифікації методу Ньютона, які з деякими наближеннями до матриці Якобі (ці методи часто мають надлінійну швидкість збіжності), в тому числі:

– методи Бroyдена і Пауелла (для симетричних матриць Якобі), в яких в ході ітераційного процесу (4.7), (4.8) обчислені на основі початкового наближення  $B^{(0)} \equiv H^{(0)}$  матриці уточнюється з використанням матрично-векторних операцій за формулами: в методі Пауелла –

$$B^{(k)} = B^{(k-1)} + \frac{y^{(k)}(w^{(k)})^T + w^{(k)}(y^{(k)})^T}{(w^{(k)})^T w^{(k)}} - \frac{((y^{(k)})^T w^{(k)})w^{(k)}(w^{(k)})^T}{((w^{(k)})^T w^{(k)})^2}, \quad \text{а в методі}$$

Бroyдена –  $B^{(k)} = B^{(k-1)} + \frac{y^{(k)}(w^{(k)})^T}{(w^{(k)})^T w^{(k)}}; \text{ тут } y^{(k)} = F^{(k)} - F^{(k-1)} - B^{(k-1)}w^{(k)};$

– метод Бурдакова, який при спеціальному виборі ітераційного параметра забезпечує глобальну збіжність до одного з розв'язків системи на основі заданого початкового наближення; ітераційний процес реалізується за формулами (4.7) та  $x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k w^{(k)}$ , де  $B^{(k)}$  – скінченно-різницева апроксимація матриці Якобі  $H^{(k)}$ , а ітераційний параметр  $\alpha_k$  обчислюється спеціальним чином.

Отже, розв'язування СНР з розрідженою структурою даних, як правило, базується на лінеаризації нелінійних рівнянь – пошук розв'язків реалізується через розв'язування послідовності систем лінійних рівнянь. Ці СЛАР (4.4) мають декілька особливостей, які впливають на вибір методів та засобів для їх розв'язування на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень, а саме:

– високий порядок – від 100 000 до десятків мільйонів;

- розріджена структура матриць СЛАР – стрічкова, профільна, блочно-розріджена тощо;
- симетричність або несиметричність матриць СЛАР;
- додатна визначеність або напіввизначеність матриць СЛАР.

При виборі ітераційного методу розв'язування СНР важливою умовою є збереження розрідженої структури матриць СЛАР, що розв'язується на кожній ітерації. Тому визначальним для вибору схем розподілу обчислень, декомпозиції та зберігання даних на паралельних комп'ютерах є відповідний алгоритм розв'язування СЛАР. Цей алгоритм в свою чергу вибирається, виходячи із вигляду та розрідженої структури матриці СЛАР.

#### **4.2. Паралельні алгоритми розв'язування СНР з розрідженою структурою даних**

Ітераційні процеси викладених вище методів розв'язування СНР з розрідженою структурою даних в загальному випадку можна записати у вигляді  $B^{(k-1)}w^{(k)} = -F^{(k-1)}, x^{(k)} = x^{(k-1)} + \alpha_k w^{(k)}$  ( $k = 1, 2, \dots$ ).

Для випадку блочно-діагональних матриць з обрамленням використовуються блочні (нециклічні) алгоритми. Відповідно в цьому випадку використовуються блочні схеми розподілу та зберігання елементів матриці і правої частини СЛАР. На верхньому рівні паралелізму обчислюються розподілені даному процесу (поток) ненульові блоки даних, максимально використовуючи (при можливості) нижні рівні паралелізму для виконання матрично-векторних і матрично-матричних операцій (див., напр., [36, 37]).

Для розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями відмінних від блочно-діагональних з обрамленням структур використовуються блочно-циклічні алгоритми. Відповідно до вимог використовуваних паралельних алгоритмів розподіляються елементи матриць та правих частин таких СЛАР. Тобто використовуються блочно-циклічні схеми. В цьому випадку також (але за блочно-циклічною схемою) на верхньому рівні паралелізму обчислюються розподілені даному процесу (поток) ненульові блоки даних, максимально

використовуючи (при можливості) нижні рівні паралелізму для виконання матрично-векторних і матрично-матричних операцій.

**Методологія розв'язування СНР.** Отже, основною операцією на кожній ітерації є розв'язування СЛАР (4.4) з розрідженою матрицею  $B^{(k-1)}$ . Пропонується наступна послідовність дій для розв'язування СНР з розрідженими даними на сучасних високопродуктивних комп'ютерах, в тому числі гібридної архітектури:

–використовуючи один з алгоритмів структурної регуляризації, формування блочно-розрідженої структури матриць СЛАР (4.6) на основі вихідної структури її ненульових елементів;

–декомпозиція розріджених матриць та розподіл отриманих рядків або стовпчиків ненульових блоків між процесорними пристроями;

–ітераційний процес розв'язування СНР – на  $k$ -й ітерації ( $k = 1, 2, \dots$ ) алгоритму методу Ньютона або квазіньютонівського виконуються наступні макрооперації:

1) обчислення розподілених між MPI-процесами компонент вектор-функції  $F^{(k-1)}$  та елементів ненульових блоків матриці  $B^{(k-1)}$ ;

2) розв'язування отриманої СЛАР (4.4), використовуючи відповідний (до структури матриці  $B^{(k-1)}$ ) паралельний алгоритм [37, 39], та обчислення розподілених між MPI-процесами компонент наступного наближення до розв'язку СНР  $x^{(k)}$ ;

3) перевірка умов закінчення ітераційного процесу за формулами [34]: спочатку  $\|F^{(k)}\| \leq \varepsilon$ , а далі –  $\|(H^{(k)})^{-1}\| \|F^{(k)}\| \leq \varepsilon$ .

Ці макрооперації виконуються на верхньому рівні паралелізму з використанням нижніх рівнів для виконання великих обсягів однорідних обчислень, в тому числі матрично-векторних та матрично-матричних операцій.

Слід зауважити, що кількість арифметичних операцій при розвиненні матриць СЛАР значно (наприклад, для стрічкових матриць – приблизно в  $m$  раз,  $m$  – напівширина стрічки) більша від кількості інших арифметичних операцій.

Тому розвинення розріджених матриць СЛАР грає визначальну роль при оцінці ефективності алгоритму розв'язування СНР. Ефективність алгоритму можна також підвищити, якщо розв'язування СЛАР з нижньою трикутною матрицею (прямий хід) виконувати одночасно з розвиненням матриці системи.

**Структурна регуляризація розріджених матриць.** Отже основною операцією на кожній ітерації є розв'язування СЛАР (4.4) з розрідженою матрицею  $B^{(k-1)}$ . Структура розріджених матриць визначається нумерацією невідомих і може бути регулярною (напр., стрічковою) або нерегулярною.

З метою зменшення кількості арифметичних операцій для розв'язування СЛАР (4.5) з розрідженою матрицею шляхом структурної регуляризації – перестановки рядків і стовпчиків (тобто перенумерації невідомих) таку матрицю приводять до одного із стандартних виглядів: стрічкового, профільного, блочно-діагонального з обрамленням, "хмарочосного" тощо. Існує декілька алгоритмів [39] оптимізації структури розрідженої матриці (фактор-дерев, Катхілл-Маккі, паралельних перерізів, мінімальної степені тощо).

Багаторівневий паралелізм передбачає використання блочних та блочно-циклічних алгоритмів на основі блочного представлення матриць. Тому доцільно структурно регуляризувати розріджену матрицю – оптимізувати блочно-розріджену структуру матриці, визначивши в блочному розбитті нульові блоки та якомога більше заповнені ненульові блоки і використавши один з названих вище алгоритмів (причому замість елементів матриці в алгоритмах використовуються блоки) [49].

### **4.3. Паралельні алгоритми розв'язування систем лінійних рівнянь з розрідженою матрицею**

Як зазначалось вище, в основі переважної частини методів розв'язування розрахункових задач, які вникають при математичному моделюванні різних процесів, явищ та об'єктів, лежить розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь (СЛАР) з розрідженими матрицями.

Розв'язування СЛАР може проводитися прямими та ітераційними методами. Більшість прямих методів засновано на ідеї послідовних

еквівалентних перетворень заданої системи з метою виключення невідомих з частини рівнянь. Різні модифікації методів виключення є по суті методами факторизації матриці системи, тобто розвинення матриці в добуток, наприклад, трикутних матриць або ортогональної і трикутної матриць. Факторизація матриці також може використовуватися в ітераційних методах.

В такому разі в задачі розв'язування СЛАР, як правило, можна виділити три підзадачі: (i) розвинення матриці системи  $A = LR$ , (ii) розв'язування СЛАР з лівою матрицею (пряма підстановка або прямий хід)  $Ly = b$ , (iii) розв'язування СЛАР з правою матрицею (зворотна підстановка або зворотний хід)  $Rx = y$ .

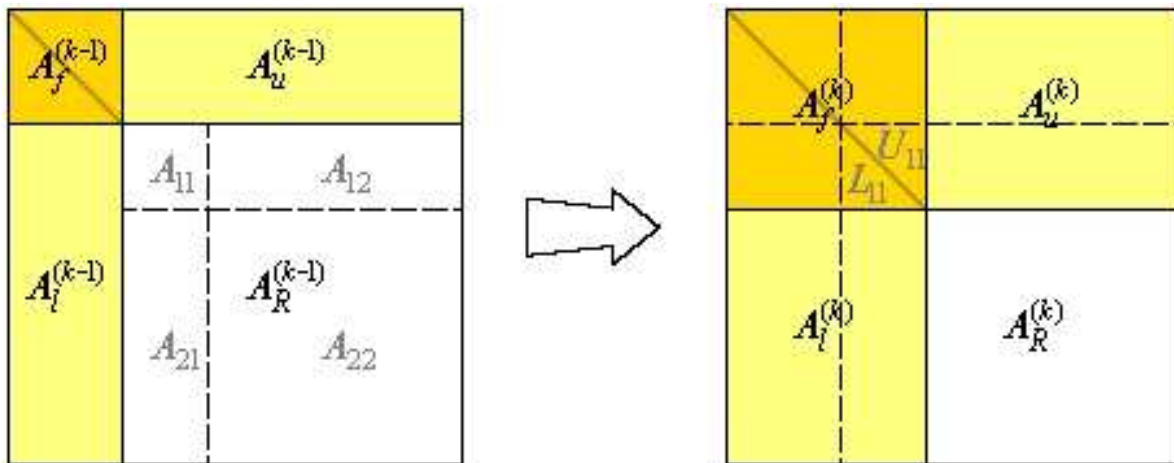
При факторизації матриці виконується значно більше арифметичних операцій ніж при розв'язуванні СЛАР з матрицями розвинення. Наприклад, розвинення стрічкової симетричної матриці потребує  $O(nm^2)$  арифметичних операцій з плаваючою комою, а розв'язування двох СЛАР з матрицями розвинення –  $O(nm)$ . Тому ефективність факторизації розріджених матриць відіграє ключову роль при розробці ефективних методів та паралельних алгоритмів розв'язування розрахункових задач, які виникають при математичному моделюванні. Далі розглянемо методи та паралельні алгоритми факторизації розріджених матриць.

#### **4.3.1 Блочні алгоритми розвинення невинроджених матриць**

Як зазначалось вище, найбільшої продуктивності сучасних комп'ютерів можна досягти, використовуючи матрично-матричні операції і відповідні програмні модулі бібліотек програм від розробників технічних засобів, наприклад, Intel MKL [40] (на багатоядерних процесорах) або CUBLAS [41] (на співпроцесорах-прискорювачах – GPU). Тому класичні методи і алгоритми (Гаусса, Холецького [42]) доцільно модифікувати, представивши їх в блочній формі.

**Блочний алгоритм методу Гаусса  $LU$ -розвинення квадратних матриць.** Розглянемо  $LU$ -розвинення квадратної матриці  $A$  порядку  $n$ . Розіб'ємо її на блоки розміру  $s \times s$ . Не втрачаючи загальності міркувань, можна вважати, що  $n/s$  – ціле число. Після  $K-1$  ( $K = 1, 2, \dots, n/s-1$ ) кроків блоки модифікованої матриці  $A^{(k-1)}$  можна схематично представити у вигляді, який зображено на рис. 4.1. ліворуч. Тут

позначено – блоки, для яких отримано  $LU$ -розвинення:  $A_f^{(k-1)} = L_1^{(k-1)}U_1^{(k-1)}$  – квадратний діагональний блок порядку  $ks-s$ ,  $A_i^{(k-1)} = L_2^{(k-1)}U_1^{(k-1)}$  – піддіагональний прямокутний блок розміру  $(r+s) \times (ks-s)$ , де  $r=n-ks$ ,  $A_u^{(k-1)} = L_1^{(k-1)}U_2^{(k-1)}$  – наддіагональний прямокутний блок розміру  $(ks-s) \times (r+s)$ , та квадратний діагональний блок, розвинення якого ще продовжується,  $A_R^{(k-1)} = P^{(k-1)}A_R^{(0)} - L_2^{(k-1)}U_2^{(k-1)}$  порядку  $r+s$ . В  $A_R^{(k-1)}$  в свою чергу виділяються 4 блоки:  $A_{11}$  – квадратний діагональний блок порядку  $s$  (провідний блок  $k$ -го кроку),  $A_{12}$  – прямокутний блок розміру  $s \times r$ ,  $A_{21}$  – прямокутний блок розміру  $r \times s$ ,  $A_{22}$  – квадратний діагональний блок порядку  $r$ .



**Рисунок 4.1** – Схема одного кроку блочного варіанта  $LU$ -розвинення.

На  $k$ -му кроці виконується розвинення (модифікація) блоку  $A_R^{(k-1)}$  згідно формул

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = P_k \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & I_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & A_R^{(k)} \end{pmatrix} = P_k \begin{pmatrix} L_{11}U_{11} & L_{11}U_{12} \\ L_{21}U_{11} & L_{21}U_{12} + A_R^{(k)} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

де  $P_k$  – матриця перестановок  $k$ -го кроку.

Спочатку згідно (4.9) методом Гаусса виконується  $LU$ -розвинення блоку  $A_{11}$ , а блоки  $L_{21}$  та  $U_{12}$  можна отримати як розв'язки матричних СЛАР  $U_{11}^T L_{21}^T = \tilde{A}_{21}^T$  та  $L_{11}U_{12} = \tilde{A}_{12}$ , де через  $\tilde{A}_{ij}$  позначено відповідні матричні блоки після перестановок. Блок  $A_R^{(k)}$  обчислюється за формулою

$$A_R^{(k)} = \tilde{A}_{22} - L_{21}U_{12}. \quad (4.10)$$

Цю операцію також називають  $s$ -ранговою модифікацією.

Слід відзначити, що на ефективність блочних алгоритмів великий вплив має стратегія вибору головного елемента. Наприклад, вибір головного елемента тільки в межах діагонального блоку  $A_{11}$  дозволяє всі інші обчислення звести до матрично-матричних операцій. Але якщо виконується пошук головного елемента, наприклад, у стовпчику, то має проводитися одночасне розвинення блоків  $A_{11}$  та  $A_{21}$  (в цьому випадку, використовуючи перетворення стовпчиків, тобто векторів). Стратегія вибору головного елемента впливає на кількість та обсяг обмінів даними між паралельними процесами. У випадку розрідженої матриці вдалий вибір стратегії може дозволити зменшити загальний обсяг арифметичних операцій.

Зауважимо, що необов'язково виконувати перестановки рядків блоків  $L_1^{(k-1)}$ ,  $L_2^{(k-1)}$  або/та стовпчиків блоків  $U_1^{(k-1)}$ ,  $U_2^{(k-1)}$ , але ці перестановки мають враховуватися при використанні матриць  $LU$ -розвинення вихідної матриці.

У випадку розрідженої матриці системи  $A$  матриці розвинення  $L$  та  $U$  також залишаються розрідженими, хоча в загальному випадку кількість ненульових елементів збільшується (причому тільки всередині профілю матриці). Тому при виконанні розвинення (4.9) блоку  $A_R^{(k-1)}$  доцільно проводити обчислення тільки з ненульовими елементами відповідних блоків матриці. Так елемент з індексами  $i$  та  $j$  матриці (блоку)  $A_R^{(k)}$  модифікується тільки в тому випадку, коли скалярний добуток  $i$ -го рядка матриці  $L_{21}$  та  $j$ -го стовпчика матриці  $U_{12}$  не дорівнює тотожно нулю. Теж саме справедливе і для блоків, на які розділено матрицю. Тому  $s$ -рангова модифікація (4.10) виконується тільки з підматрицею матриці  $L_{21}U_{12}$ , яка складається з її ненульових елементів або ненульових блоків.

**Блочні алгоритми методу Холецького розвинення симетричних матриць.**  $LL^T$ -розвинення симетричної матриці виконується аналогічним чином з урахуванням того, що в цьому випадку  $U_{12} = (L_{21})^T$ . Це дозволяє зменшити кількість арифметичних операцій майже в 2 рази.

У випадку  $LDL^T$ -розвинення у формулах (4.9) і (4.10) необхідно покласти  $U_{11} = D_1(L_{11})^T$ ,  $U_{12} = D_1(L_{21})^T$ , де  $D_1$  – діагональна матриця з  $LDL^T$ -розвинення



блоку  $A_{11}$ . Зауважимо, що в цьому випадку добуток  $L_{21}U_{12} \equiv L_{21}D_1(L_{21})^T$  – симетрична матриця. Тому і в цьому випадку кількість арифметичних операцій зменшується майже в 2 рази, якщо обчислення проводити у такій послідовності: (i)  $LDL^T$ -розвинення блоку  $A_{11}$ , (ii) обчислення блоку  $U_{12}$ , (iii) обчислення блоку  $L_{21} = (U_{12})^T(D_1)^{-1}$ , (iv)  $s$ -ранговою модифікація (4.10).

#### **4.3.2 Блочно-циклічні алгоритми $LU$ -розвинення розріджених несиметричних матриць**

Для випадку багаторівневої моделі паралельних обчислень в [43-57] запропоновано та досліджено низку варіантів паралельних блочно-циклічних алгоритмів розв'язування СЛАР з розрідженими, зокрема стрічковими матрицями. В цих алгоритми використовуються циклічні схеми розподілу ненульових блоків матриці – рядкова та стовпчикова. Причому розподіл здійснюється так, щоб кожен процес (потік) мав хоча б один рядок або стовпчик блоків, що модифікується згідно (4.10) на даному кроці. Якщо необхідно вибирати головні елементи у стовпчиках матриці, то більш ефективною виявилась циклічна схема розподілу стовпчиків блоків матриці.

**Блочний циклічний алгоритм  $LU$ -розвинення стрічкової несиметричної матриці.** Розглянемо матрицю  $A$  порядку  $n$  з  $m_l$  піддіагоналями та  $m_u$  наддіагоналями. При  $LU$ -розвиненні за рахунок перестановок при виборі головного елемента в загальному випадку кількість наддіагоналей у верхній трикутній матриці  $U$  може збільшитись до  $m_u + m_l$ . В більшості випадків нижня трикутна матриця  $L$  в явному вигляді не формуються, а перестановки враховуються при розв'язуванні СЛАР  $Ly = Pb$  [48, 54].

Пропонований алгоритм базується на викладеному вище блочному алгоритмі методу Гаусса  $LU$ -розвинення квадратних матриць.

**Декомпозиція і розподіл між процесорними пристроями елементів матриці.** Матрицю  $A$  поділено на квадратні блоки порядку  $s$  (для спрощення викладу вважатимемо, що  $n = Ns$ ,  $m_l = M_Ls$ ,  $m_l + m_u = M_US$ ):

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,M_U+1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ A_{2,1} & A_{2,2} & \dots & A_{2,M_U+1} & A_{2,M_U+2} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & & & \\ A_{M_L+1,1} & A_{M_L+1,2} & & & & & & \\ 0 & A_{M_L+2,2} & & & & & & \\ 0 & 0 & & & \ddots & \vdots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & & \dots & A_{N-1,N-1} & A_{N-1,N} & \\ 0 & 0 & & & \dots & A_{N,N-1} & A_{N,N} & \end{pmatrix}.$$

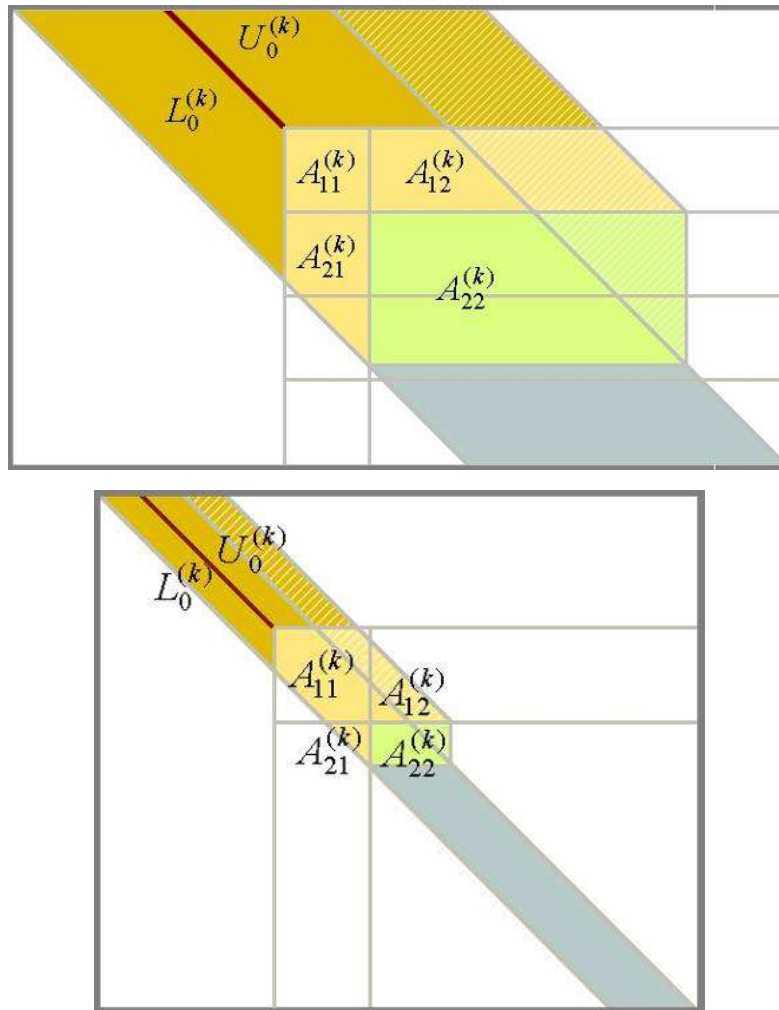
Зважаючи на викладений далі поділ одного кроку алгоритму на макрооперації, доцільно між потоками вищого рівня паралелізму циклічно розподіляти стовпчики блоків матриць (їх ще називають "плитками" – tiles) так, щоб кожен процес мав хоча б один стовпчик блоків, що модифікується згідно (4.10) на даному кроці. Наприклад, блоки, які знаходяться в стовпчику з номером  $t$ , розподіляються потоку з логічним номером  $(t-1) \bmod p$ . В наведених тут і далі алгоритмах доцільно об'єднувати квадратні блоки відповідного стовпчика блоків в прямокутні блоки, розмір яких має бути оптимальним з точки зору кешування даних (щоб оптимізувати обміни даними між пам'яттями різної швидкодії) або використання GPU комп'ютерів гібридної архітектури. З цих же міркувань вибирається і схема зберігання (стовпчикова чи рядкова) елементів цих блоків.

МРІ-процес (потік), який містить на  $K$ -му кроці алгоритму  $K$ -й стовпчик блоків (блоки  $A_{11}^{(K)}$  і  $A_{21}^{(K)}$ ), далі називається провідним CPU (як і пов'язаний з ним GPU у випадку гібридного алгоритму). У пам'яті GPU на кожному кроці гібридного алгоритму досить зберігати тільки (також циклічно розподілені) ненульові блоки підматриці, які обробляються.

*Алгоритм.* На рис. 4.2. зображено вигляд фрагментів несиметричної стрічкової матриці перед  $K$ -м кроком алгоритму – праворуч, якщо  $m_l + m_u > s$ , а ліворуч, якщо ширина стрічки  $m_l + m_u \leq s$ . Як видно з рисунку, можливість розпаралелити обчислення між потоками вищого рівня паралелізму є лише у випадку  $m_l + m_u \geq ps$ ,  $p > 1$ , причому ефективність цього розпаралелення тим вища, чим більше  $p$ . З іншого боку, як показали числові експерименти найвища

ефективність використання як сучасних GPU, так і багатоядерних процесорів Intel Xeon Phi серії x200 досягається для досить великих значень  $s$  – від 64 до 192. Тому пропонується далі алгоритм варто застосовувати саме у випадку  $m_l + m_u \geq ps, p > 1$ .

У разі вибору головного елемента в стовпчиках діагонального блоку для  $K = 1, \dots, N$  виконуються наступні макрооперації (нижче тильдою відмічено блоки матриці після перестановок, див. рис. 4.2).



**Рисунок 4.2** – Схеми одного кроку блочного  $LU$ -розвинення стрічкових матриць

1) Для  $K > 1$ , використовуючи  $s$ -рангову модифікацію (4.10), обчислення діагонального блоку  $A_{11}^{(K)} = \tilde{A}_{K,K} - L_{K,K-1} U_{K-1,K}$ .

2) Для  $K > 1$  пересилання провідному CPU  $K$ -го кроку обчисленого блоку  $A_{11}^{(K)}$  (на комп'ютері гібридної архітектури або при використанні розподіленої пам'яті).

3)  $LU$ -розвинення з частковим вибором головного елемента діагонального блоку

$$A_{11}^{(K)} = L_{11}^{(K)} U_{11}^{(K)}. \quad (4.11)$$

Розвинення (4.11) доцільно виконати на провідному CPU, використовуючи високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL [40], з частковим вибором головних елементів в стовпчиках підматриці  $A_{11}^{(K)}$ .

4) Для  $K < N-1$   $s$ -рангова модифікація (4.10) ненульових блоків  $\tilde{A}_{I,J}$  ( $K \leq I \leq N$ ,  $K \leq J \leq N$ , виключаючи діагональний блок  $\tilde{A}_{K,K}$ ) підматриці  $\tilde{A}_{22}^{(K)}$ :

$$A_{I,J} \leftarrow \tilde{A}_{I,J} - L_{I,K-1} U_{K-1,J}. \quad (4.12)$$

Макрооперації (4.12) виконуються на нижніх рівнях паралелізму за умов  $L_{I,K}, U_{K,J} \neq 0$  відповідно до розподілу блоків  $A_{I,J}$  між процесорними пристроями.

5) Для  $K < N-1$  розсилка обчислених блоків  $L_{11}^{(K)}, U_{11}^{(K)}$  та інформації про перестановки всім процесорним пристроям, які використовуються.

6) Для  $K < N-1$  обчислення ненульових блоків  $L_{I,K}$  ( $K+1 \leq I \leq N$ ) підматриці  $L_{21}^{(K)}$  – розв’язування матричних СЛАР з нижньою трикутною матрицею:

$$(U_{11}^{(K)})^T (L_{I,K})^T = (\tilde{A}_{I,K})^T. \quad (4.13)$$

Макрооперації (4.13) виконуються на провідних процесорних пристроях  $K$ -го кроку на нижніх рівнях паралелізму.

7) Для  $K < N-1$  розсилка всім процесорним пристроям, які використовуються, обчислених ненульових блоків  $L_{I,K}$  ( $K+1 \leq I \leq N$ ) підматриці  $L_{21}^{(K)}$ .

8) Для  $K < N-1$  обчислення ненульових блоків  $U_{K,J}$  ( $K+1 \leq J \leq N$ ) підматриці  $U_{12}^{(K)}$  – розв’язування матричних СЛАР з нижньою трикутною матрицею:

$$L_{11}^{(K)} U_{K,J} = \tilde{A}_{K,J}. \quad (4.14)$$

Макрооперації (4.14) виконуються (з урахуванням перестановок рядків) на нижніх рівнях паралелізму відповідно до розподілу блоків  $\tilde{A}_{K,J}$ .

Аналіз формул (4.11) - (4.14) показав, що більшість обчислень можна реалізувати на нижчих рівнях паралелізму, використовуючи програмні модулі для матрично-матричних (або матрично-векторних) операцій від розробників технічних засобів, наприклад, багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на співпроцесорах-прискорювачах – GPU).

Ефективність алгоритму можна підвищити, якщо виконувати розвинення (4.11) (п. 3) і розсилку блоків розвинення (п. 5) одночасно (паралельно, асинхронно) із закінченням виконання макрооперацій (4.12) (п. 4) попереднього кроку, використовуючи різні потоки верхнього рівня паралелізму або CPU і GPU на комп'ютерах гібридної архітектури. Також підвищити ефективність алгоритму можна за рахунок одночасного виконання обчислень і обмінів даними між різними процесорними пристроями, наприклад, обміни даними (пп. 2, 7) виконувати на фоні обчислень.

Якщо пам'яті GPU недостатньо для зберігання всіх даних, які розподіляються даному процесорному пристрою, то п. 5 доповнюється операціями пересилання на CPU обчислених раніше ненульових блоків підматриці і пересилання на GPU блоків вихідної матриці, необхідних для  $K$ -го кроку, у відповідності з їх розподілом. Копіювання в пам'ять CPU блоків виконується також для збереження матриць  $LU$ -розвинення з метою їх багаторазового використання.

Якщо необхідно вибирати головні елементи в стовпиках підматриць  $A_{11}^{(K)}$  і  $A_{21}^{(K)}$ , то замість (4.11) та (4.13) має виконуватись розвинення

$$\begin{pmatrix} A_{1,l} \\ \vdots \\ A_{k,l} \end{pmatrix} = P_l \begin{pmatrix} L_{1,l} \\ \vdots \\ L_{k,l} \end{pmatrix} U_{1,l}, \quad (4.15)$$

а у викладений алгоритм необхідно внести наступні зміни: в пп. 1-3 замінити діагональний блок  $A_{11}^{(K)}$  прямокутною підматрицею, що складається з

діагонального блоку  $A_{11}^{(K)}$  і піддіагонального прямокутного блоку  $A_{21}^{(K)}$ , п. 6 – виключити.

Зауважимо, що на  $I$ -му кроці цього алгоритму операції проводяться тільки з блоками підматриці розміру  $(J+1)s \times (K+1)s$ , лівий верхній блок якої  $A_{II}$ . Кількість арифметичних операцій можна зменшити, якщо виключити в (4.12) та (4.13) операції з останніми нульовими стовпчиками прямокутного блоку  $U_{12}$  з (4.9) (рядка блоків  $U_{I,I+1}, U_{I,I+2}, \dots, U_{I,J}$ ). В цьому разі на  $I$ -му кроці алгоритму операції проводитимуться з підматрицею розміру  $(j_I - Is + s) \times (K+1)s$ , де  $j_I$  – максимальне значення другого індексу ненульових елементів блоку  $U_{12}$ .

Як зазначалось вище, на ефективність алгоритмів, які реалізують блочний варіант  $LU$ -розвинення, великий вплив має стратегія вибору головного елемента. Ця стратегія впливає на кількість та обсяг обмінів даними між обчислювальними пристроями, які використовуються. Наприклад, при частковому виборі головного елемента серед елементів стовпчика матриці найбільш ефективним є варіант, коли головний елемент вибирається тільки серед елементів стовпчика провідного діагонального блоку, менш ефективним є вибір серед елементів стовпчика, які розподілено провідному процесу (поток), а найменш ефективним (з точки зору кількості операцій, обмінів та синхронізацій) є вибір серед всіх ненульових елементів стовпчика.

Даний алгоритм може бути реалізовано як на одновузлових комп'ютерах з декількома GPU (використовуючи POSIX Threads, OpenMP тощо), так і на багатовузлових комп'ютерах (використовуючи MPI).

**Ефективність алгоритму.** Ефективність розпаралелювання розв'язування СЛАР визначається ефективністю алгоритмів розвинення матриці системи, так як кількість арифметичних операцій, які виконуються при розвиненні (4.11), у багато разів більше кількості операцій, які виконуються при розв'язуванні систем  $PLy = b$  або  $Ux = y$ .

Дослідимо ефективність гібридного варіанту блочного циклічного алгоритму  $LU$ -розвинення (з вибором головного елемента в межах діагонального

блоку) стрічкової несиметричною матриці порядку  $n$  з  $m_l$  піддіагоналями і  $m_u$  наддіагоналями (використовується архітектура з  $p$  CPU та  $p$  GPU).

Через  $O_k$  позначимо кількість арифметичних операцій, які виконуються при реалізації  $k$ -ої макрооперації алгоритму. Справедливі наступні оцінки:  $O_{4a} \approx 2s^3/3$ ,  $O_{4b} \approx m_l s^2$ ,  $O_6 \approx 2m_l m_u s / p$ ,  $O_8 \approx m_u s^2 / p$  (операції п. 1 провідного GPU враховані в  $O_6$ ). Позначимо:  $t_C$ ,  $t_G$  – середні часи виконання однієї арифметичної операції на CPU і на GPU відповідно,  $n_o$  – кількість арифметичних операцій, які GPU може виконувати одночасно. Оскільки GPU реалізує архітектуру SIMD, то середній час витрачений одним GPU на виконання  $O$  однорідних арифметичних операцій оцінюється величиною  $t_G O / n_o$ .

Макрооперації пп. 2, 3, 5, 7, 8 пов'язано з обмінами даними всередині або між процесорними пристроями. У більшості випадків часом обмінів між CPU і GPU, а також на перестановки рядків можна знехтувати. Якщо для розсилки даних від одного GPU всім іншим використовується алгоритм «дерева» [41], то загальний час мультирозсилки (з одного GPU  $p$  CPU або з одного CPU  $p$  GPU, включаючи синхронізації) масиву  $q$  подвійних слів можна в середньому оцінити величиною  $q(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)$ . Тут  $t_{CC}$  – середній час пересилки одного подвійного слова між двома CPU;  $t_{CG}$  – час обміну одним подвійним словом між CPU і GPU.

Для варіанта гібридного алгоритму, що розглядається, справедливі такі оцінки ( $T_k$  – час виконання одного кроку алгоритму на  $k$  CPU і  $k$  GPU,  $S_p = T_1 / T_p$  – коефіцієнт прискорення,  $E_p = S_p / p$  – коефіцієнт ефективності [52]).

$$\text{Якщо} \quad 2ps \leq m_u, \quad t_{CG} \leq \frac{2}{3} \frac{ps^2}{m_u} t_C, \quad t_{CG} + \frac{s}{3} t_C \leq \frac{m_l m_u - ps^2}{ps} \frac{t_G}{n_o},$$

то для гібридного блочно-циклічного алгоритму  $LU$ -розвинення стрічкової несиметричною матриці справедливі оцінки

$$T_1 \approx ((2m_u + s)m_l + sm_u) s \frac{t_G}{n_o}, \quad T_p \approx ((2m_u + ps)m_l + \tau) \frac{s}{p} \frac{t_G}{n_o},$$

$$S_p \approx p \left( 1 - \frac{(p-1)sm_l - sm_u + \tau}{(2m_u + ps)m_l + \tau} \right), \quad E_p \approx 1 - \frac{(p-1)sm_l - sm_u + \tau}{(2m_u + ps)m_l + \tau}, \quad (4.16)$$

$$\text{де } \tau = \begin{cases} sm_u, & \text{якщо } \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq \frac{s}{p} \frac{m_u}{m_l} \\ pm_l \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G}, & \text{якщо } \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq m_l \end{cases}.$$

Зауважимо, що умови можуть бути виконані шляхом підбору кількості процесорних пристроїв  $p$  і розміру блоків  $s$ .

Оцінки (4.16) свідчать, що ефективність алгоритму не залежить від порядку матриці, а при певних умовах визначається кількістю ненульових блоків в рядку блоків і розмірами цих блоків. На ефективність алгоритму також може впливати відношення часу мультирозсилки одного подвійного слова і значення  $t_G/n_o$ . Якщо запропонований алгоритм реалізується на комп'ютері з багатоядерними процесорами, використовуючи модель багаторівневого паралелізму, то прискорення та ефективність такого варіанта алгоритму можна оцінити тими ж формулами (4.16). При цьому:  $p$  – кількість процесів (потоків) верхнього рівня паралелізму,  $t_G = t_C$ ,  $n_o$  – кількість потоків нижнього рівня паралелізму, пов'язаних з одним потоком верхнього рівня,  $t_{CG} = 0$ .

#### **Блочно-циклічні алгоритми $LU$ -розвинення розріджених матриць.**

Блочно-циклічний алгоритм  $LU$ -розвинення стрічкової матриці без суттєвих змін може бути використано і для розріджених несиметричних матриць з іншими структурами (наприклад, профільною, блочно-хмарочосною) за умови, що або не потрібно виконувати вибір головного елемента, або достатньо робити цей вибір в межах діагонального блоку, або можливо передбачити структуру верхньої трикутної матриці розвинення  $U$ . Блочний алгоритм  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням розглядається нижче в п. 4.3.4.

#### **4.3.3 Блочні циклічні алгоритми розвинення розріджених симетричних додатньо визначених матриць.**

Аналогічно до блочно-циклічної реалізації  $LU$ -розвинення розріджених матриць реалізуються блочно-циклічні алгоритми  $LL^T$  або  $LDL^T$ -розвинень. Тут також використовується одновимірна блочно-циклічна схема розподілу та обробки ненульових блоків симетричної матриці, але не всіх, а тільки верхнього або нижнього трикутника (а для симетричних матриць – це з точністю до



транспонування ті ж самі блоки). Якщо операції виконуються з нижнім трикутником, то циклічно розподіляються стовпчики ненульових блоків або рядки ненульових блоків (включаючи відповідно нижній або верхній трикутник діагонального блоку), якщо використовується верхній трикутник матриці.

**Декомпозиція і розподіл між процесорними пристроями елементів розріджених матриць.** Розглядатимемо наступні розріджені матриці: стрічкові, профільні та хмарочосної структури. Слід звернути увагу, що це розріджені структури трикутних розвинень вихідних матриць, які отримують, виконавши відповідне символічне розвинення.

Розріджену симетричну матрицю  $A$  поділимо на квадратні блоки порядку  $s$  (для спрощення викладу вважатимемо, що  $n = Ns$ ). Наприклад, блочне представлення стрічкової матриці має вигляд ( $M = \lceil m/s \rceil + 1$ ,  $m$  – напівширина стрічки,  $\lceil a \rceil$  – ціла частина числа  $a$ )

$$A = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \cdots & A_{1,M} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ A_{1,2}^T & A_{2,2} & \cdots & A_{2,M} & A_{2,M+1} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & & & & \\ A_{1,M}^T & A_{2,M}^T & & & & & & \\ 0 & A_{2,M+1}^T & & & & & & \\ 0 & 0 & & & \ddots & \vdots & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & & \cdots & A_{N-1,N-1} & A_{N-1,N} & \\ 0 & 0 & & & \cdots & A_{N-1,N}^T & A_{N,N} & \end{pmatrix}. \quad (4.17)$$

Далі між потоками (процесами) вищого рівня паралелізму циклічно розподіляються рядки блоків матриць так, щоб кожен процес мав хоча б один рядок блоків, що модифікується згідно (4.10) на даному кроці. Наприклад, блоки, які знаходяться в рядку з номером  $t$ , розподіляються потоку з логічним номером  $(t-1) \bmod p$ .

Доцільно об'єднувати розташовані поряд ненульові блоки (або їх ненульові частини) відповідного рядка блоків в прямокутні блоки, розмір яких має бути оптимальним з точки зору кешування даних (щоб оптимізувати обміни даними між пам'ятями різної швидкодії) або використання GPU комп'ютерів гібридної архітектури. З цих же міркувань вибирається і схема

зберігання (стовпчикова чи рядкова) елементів цих блоків. У випадку стрічкової або профільної матриці при такому об'єднанні кожний ( $K$ -й) рядок блоків складається з діагонального блоку (порядку  $s$ )  $A_{K,K}$  та прямокутного блоку  $A_{K,K+1}$  (який має  $s$  рядків). Далі така матриця може розглядатися (відповідно) як блочно-стрічкова або блочно-профільна. У випадку матриці хмарочосної структури при такому об'єднанні можна отримати крім діагонального блоку  $A_{K,K}$  декілька ( $M_K$ ) ненульових прямокутних блоків  $A_{K,K+L}$  ( $L = 1, \dots, M_K$ ), між якими розташовуються прямокутні нульові блоки.

МРІ-процес (потік), який містить на  $K$ -му кроці алгоритму  $K$ -й рядок блоків (блоки  $A_{11}^{(K)}$  і  $A_{12}^{(K)}$ ), далі називається провідним CPU (як і пов'язаний з ним GPU у випадку гібридного алгоритму). У пам'яті GPU на кожному кроці гібридного алгоритму досить зберігати тільки (також циклічно розподілені) ненульові блоки підматриці, які обробляються.

**Циклічний алгоритм  $LDL^T$ -розвинення симетричної матриці блочно-хмарочосної структури.** Розглянемо найбільш загальний випадок блочно-розрідженої структури – блочно-хмарочосну. Адже, блочно-стрічкова або блочно-профільна структури по суті є частинними випадками блочно-хмарочосної структури – з одним наддіагональним блоком в рядку блоків. Вибір  $LDL^T$ -розвинення зумовлений тим, що  $LDL^T$ -розвинення може використовуватися для більшої множини матриць, ніж  $LL^T$ -розвинення, наприклад, для невідроджених знаконевиначених симетричних матриць. При цьому алгоритми цих розвинень суттєво не відрізняються. Лише для  $LDL^T$ -розвинення необхідно мати додатковий робочий масив, щоб не збільшувалась кількість арифметичних операцій.

Цей алгоритм розроблено на основі паралельних алгоритмів  $LDL^T$ -розвинення симетричних матриць стрічкової, профільної та хмарочосної структур (див., напр., [42, 44]) і базується описаних в п. 4.3.1 блочних алгоритмах.

Розглядаємо варіант алгоритму, який використовує багаторівневу модель паралельних обчислень. На вищому рівні використовується  $p$  процесів

(потоків), які переважно забезпечують комунікації між собою та між процесорними пристроями, що реалізують переважну більшість арифметичних операцій нижчих рівнів паралелізму.

Позначимо (тут і далі використовуються позначення рис. 4.1, 4.2)  $D_K$  – діагональна матриця з  $LDL^T$ -розвинення діагонального блоку  $A_{11}^{(K)}$ ,  $U_{K,J}$  – квадратний блок порядку  $s$  підматриці  $U_{12}^{(K)}$ ,  $G_{J,K} = U_{K,J}^T D_K$  ( $K = 1, \dots, N$ ,  $J = K, \dots, N$ ). Тоді для  $K = 1, \dots, N$  виконуються наступні макрооперації.

1) Для  $K > 1$  за умови  $U_{K-1,K} \neq 0$ , використовуючи  $s$ -рангову модифікацію (4.10), обчислення верхнього трикутника діагонального блоку

$$A_{11}^{(K)} = A_{K,K} - G_{K,K-1} U_{K-1,K}. \quad (4.18)$$

2) Для  $K > 1$  пересилання провідному CPU  $K$ -го кроку обчисленого блоку  $A_{11}^{(K)}$  (на комп'ютері гібридної архітектури).

3)  $LDL^T$ -розвинення діагонального блоку

$$A_{11}^{(K)} = (U_{11}^{(K)})^T D_K U_{11}^{(K)}. \quad (4.19)$$

Розвинення (4.19) доцільно виконати на провідному CPU, використовуючи високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL.

4) Для  $K < N-1$   $s$ -рангова модифікація (4.10) ненульових блоків  $A_{I,J}$  ( $K \leq I \leq N$ ,  $K \leq J \leq M_I$ , виключаючи діагональний блок  $A_{K,K}$ ) підматриці  $A_{22}^{(K)}$ :

$$A_{I,J} \leftarrow A_{I,J} - G_{I,K-1} U_{K-1,J}. \quad (4.20)$$

Макрооперації (4.20) виконуються на нижніх рівнях паралелізму за умов  $G_{I,K-1}, U_{K-1,J} \neq 0$  відповідно до розподілу блоків  $A_{I,J}$  між процесорними пристроями.

5) Для  $K < N-1$  розсилка обчислених блоків  $D_K, U_{11}^{(K)}$  всім процесорним пристроям, які використовуються.

6) Для  $K < N-1$  обчислення ненульових блоків  $G_{I,K}$  ( $K+1 \leq I \leq N$ ) – розв'язування матричних СЛАР з нижньою трикутною матрицею:

$$(U_{11}^{(K)})^T (G_{I,K})^T = (A_{I,K})^T. \quad (4.21)$$

Макрооперації (4.21) виконуються на провідних процесорних пристроях  $K$ -го кроку на нижніх рівнях паралелізму.

7) Для  $K < N-1$  розсилка всім процесорним пристроям, які використовуються, обчислених ненульових блоків  $G_{I,K}$  ( $K+1 \leq I \leq N$ ).

8) Для  $K < N-1$  обчислення ненульових блоків  $U_{K,J}$  ( $K+1 \leq J \leq N$ ):

$$U_{K,J} = D_K^{-1} (G_{J,K})^T. \quad (4.22)$$

Макрооперації (4.22) виконуються на нижніх рівнях паралелізму.

Аналіз формул (4.18) - (4.22) показав, що більшість обчислень можна реалізувати на нижчих рівнях паралелізму, використовуючи програмні модулі для матрично-матричних (або матрично-векторних) операцій від розробників технічних засобів, наприклад, багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на співпроцесорах-прискорювачах – GPU).

Ефективність алгоритму можна підвищити, якщо виконувати розвинення (4.19) (п. 3) і розсилку блоків розвинення (п. 5) одночасно (паралельно, асинхронно) із закінченням виконання макрооперацій (4.20) (п. 4) попереднього кроку, використовуючи різні потоки верхнього рівня паралелізму або CPU і GPU на комп'ютерах гібридної архітектури. Також підвищити ефективність алгоритму можна за рахунок одночасного виконання обчислень і обмінів даними між різними процесорними пристроями, наприклад, обміни даними (пп. 2, 5, 7) виконувати на фоні обчислень.

Якщо на гібридному комп'ютері пам'яті GPU недостатньо для зберігання всіх даних, які розподіляються даному процесорного пристрою, то п. 5 доповнюється операціями пересилання на CPU обчислених раніше ненульових блоків підматриці і пересилання на GPU блоків вихідної матриці, необхідних для  $K$ -го кроку, у відповідності з їх розподілом. Копіювання в пам'ять CPU блоків розвинення виконується також для збереження матриць  $LDL^T$ -розвинення з метою їх багаторазового використання.

В цьому алгоритмі переважна кількість арифметичних операцій виконується на нижніх рівнях паралелізму. Тому можливо використовувати один процес (потік) верхнього рівня, але необхідно забезпечити ефективне розпаралелення обчислень на нижніх рівнях (між потоками нижніх рівнів або між GPU).

### **$LL^T$ -розвинення симетричної матриці блочно-хмарочосної структури.**

Якщо виконується  $LL^T$ -розвинення, то в алгоритм необхідно внести деякі зміни. У пп. 1, 4, 6, 7 замінити блоки  $G_{J,K}$  блоками  $U_{K,J}^T$ , в п. 3 (4.19) замінити формулою  $A_{11}^{(K)} = (U_{11}^{(K)})^T U_{11}^{(K)}$ , виключити п. 8. Все інше, включаючи розподіл обчислень між рівнями паралелізму та процесорними пристроями залишається без змін.

**Розвинення симетричних блочно-стрічкових та блочно-профільних матриць.** Як зазначалось вище в матрицях таких структур ненульові наддіагональні блоки матриці розвинення  $U$  розташовані щільно. Тому в алгоритмах розвинення симетричної матриці блочно-хмарочосної структури слід замінити  $N$  на  $M_{K-1}$  або на  $M_K$  з (4.18) у визначеннях множини значень індексів  $J$  або  $I$ . Тобто, на  $K$ -му кроці цих алгоритмів операції проводяться тільки з блоками підматриці розміру  $(M_K+1)s \times (M_K+1)s$ , лівий верхній блок якої  $A_{K,K}$ .

**Ефективність алгоритмів.** Дослідимо ефективність гібридного варіанту блочного циклічного алгоритму  $LDL^T$ -розвинення стрічкової симетричної матриці порядку  $n$  з півшириною стрічки  $m$  (використовується архітектура з  $p$  CPU та  $p$  GPU).

Використовуючи тут і далі позначення п. 4.3.2., маємо наступні оцінки:  $O_3 \approx s^3/3$ ,  $O_4 \approx m^2 s/p$ ,  $O_6 \approx ms^2$ ,  $O_6 \approx ms$  (операції п. 1 провідного GPU враховані в  $O_4$ ).

Макрооперації пп. 2, 5, 7 пов'язано з обмінами даними всередині або між процесорними пристроями. У більшості випадків часом обмінів між CPU і GPU можна знехтувати. Якщо для розсилки даних від одного GPU всім іншим використовується алгоритм «дерева» [34], то загальний час мультирозсилки (з

одного GPU  $p$  CPU або з одного CPU  $p$  GPU, включаючи синхронізації) масиву  $q$  подвійних слів можна в середньому оцінити величиною  $q(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)$ .

Для варіанта гібридного алгоритму, що розглядається, справедливі такі оцінки.

Якщо  $2ps \leq m$ ,  $t_{CG} \leq \frac{1}{3} \frac{ps^2}{m} t_C$ ,  $t_{CG} + \frac{s}{3} t_C \leq \frac{m^2 - ps^2}{ps} \frac{t_G}{n_o}$ , то для гібридного блочно-

циклічного алгоритму  $LDL^T$ -розвинення стрічкової симетричною матриці справедливі оцінки

$$\begin{aligned} T_1 &\approx (m+s)sm \frac{t_G}{n_o}, \quad T_p \approx ((m+ps)m + \tau) \frac{s}{p} \frac{t_G}{n_o}, \\ S_p &\approx p \left( 1 - \frac{(p-1)sm + \tau}{(m+ps)m + \tau} \right), \quad E_p \approx 1 - \frac{(p-1)sm + \tau}{(m+ps)m + \tau}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

$$\text{де } \tau = \begin{cases} sm, & \text{якщо } \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq \frac{s}{p} \\ pm \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G}, & \text{якщо } \frac{n_o(t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)}{t_G} \leq m \end{cases}.$$

Зауважимо, що умови теореми можуть бути виконані шляхом підбору кількості процесорних пристроїв  $p$  і розміру блоків  $s$ .

Оцінки (4.23) свідчать, що ефективність алгоритму не залежить від порядку матриці, а при певних умовах визначається кількістю ненульових блоків в рядку блоків і розмірами цих блоків. На ефективність алгоритму також може впливати відношення часу мультирозсилки одного подвійного слова і значення  $t_G/n_o$ .

Якщо запропонований алгоритм реалізується на комп'ютері з багатоядерними процесорами, використовуючи модель багаторівневого паралелізму, то прискорення та ефективність такого варіанта алгоритму можна оцінити тими ж формулами (4.23). При цьому:  $p$  – кількість процесів (потоків) верхнього рівня паралелізму,  $t_G = t_C$ ,  $n_o$  – кількість потоків нижнього рівня паралелізму, пов'язаних з одним потоком верхнього рівня,  $t_{CG} = 0$ .

У випадку блочно-профільної матриці теж справедливі оцінки (4.23), якщо напівширину стрічки  $m$  замінити середньою кількістю наддіагональних елементів в одному рядку профілю верхньої трикутної матриці  $U$ .

#### 4.3.4 Паралельні алгоритми розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням.

Історично перші паралельні алгоритми трикутного розвинення розрідженої матриці було розроблені для блочно-діагонального з обрамленням (див. напр., [39], п. 4.1 та рис. 4.3.) представлення даної матриці. Цей алгоритм застосовується також для  $LU$ -розвинення стрічкових матриць з вузькою стрічкою шляхом віртуального зведення матриці до блочно-діагонального вигляду з обрамленням, використовуючи метод паралельних перерізів. В [47] запропоновано гібридні алгоритми  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням.

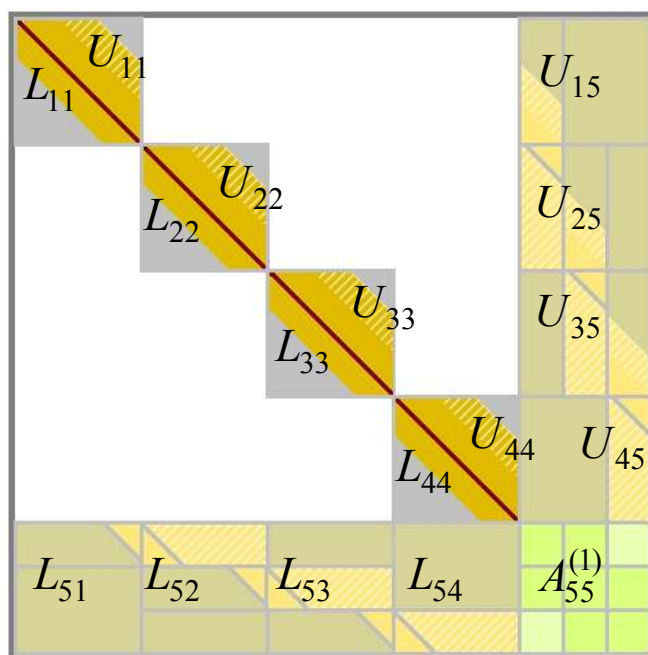


Рисунок 4.3 – Схема  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням

**Паралельний блочний алгоритм  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням.** Розглянемо блочно-діагональну матрицю з обрамленням, яка складається з  $p$  діагональних блоків  $A_{k,k}$  та обрамлення – діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}$ , рядка з  $p$  піддіагональних блоків  $A_{p+1,k}$  та стовпчика з  $p$  наддіагональних блоків  $A_{k,p+1}$  ( $k = 1, \dots, p$ ). Всі діагональні блоки  $A_{k,k}$

( $k = 1, \dots, p$ ) мають приблизно однаковий порядок, який значно (на порядок або більше) перевищує порядок блоку  $A_{p+1,p+1}$ . Зауважимо, що у випадку зведення стрічкової матриці до блочно-діагональної з обрамленням це обрамлення має блочно-дводіагональну структуру.

Пропонований алгоритм також базується на викладеному вище в п. 4.3.1 блочному алгоритмі методу Гаусса  $LU$ -розвинення квадратних матриць, а блочно-діагональна з обрамленням структура матриці дозволяє виконувати  $LU$ -розвинення великих діагональних блоків  $A_{k,k}$  ( $k = 1, \dots, p$ ) незалежно один від одного, тобто паралельно.

**Декомпозиція і розподіл між процесорними пристроями елементів матриці.** Розподіл даних між  $p$  паралельними потоками (процесами) вищого рівня паралелізму доцільно виконати так: потоку з порядковим номером  $k$  ( $k = 1, \dots, p$ ) розподіляються блоки  $A_{k,k}$ ,  $A_{p+1,k}$ ,  $A_{k,p+1}$ , на місці яких надалі можуть розміщуватися відповідні блоки матриць  $L$  та  $U$ , і виділяється пам'ять для квадратного блоку  $G_{k,k} = -L_{p+1,k}U_{k,p+1}$  та (при необхідності) для блоків  $L_{k,k}$ ,  $L_{p+1,k}$ ,  $U_{k,k}$ ,  $U_{k,p+1}$ . Блок  $A_{p+1,p+1}$  розподіляється одному з потоків, наприклад з порядковим номером  $p$ .

Слід зауважити, що можливості алгоритмів цієї групи обмежені через суттєве зростання щільності при розвиненні блоків обрамлення. Це викликає в свою чергу значне зростання кількості арифметичних операцій. Так ефективність алгоритму (для комп'ютерів тільки з багатоядерними процесорами) для випадку стрічкової матриці обмежена зверху 25% через те, що при зведенні такої матрицю до блочно-діагональної матриці з обрамленням кількість арифметичних операцій збільшується в 4 рази. Тому для реалізації операцій з блоками обрамлення доцільно використовувати розпаралелення на нижчих рівнях, наприклад, використати GPU на комп'ютерах гібридної архітектури.

**Алгоритм.** Таким чином,  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням виконується за два етапи згідно (4.21). На першому етапі незалежно виконуються наступні операції ( $k = 1, \dots, p$ ):



1)  $LU$ -розвинення діагонального блоку  $A_{k,k} = L_{k,k}U_{k,k}$  з частковим вибором головних елементів в стовпчиках блоку  $A_{k,k}$ , для цього розвинення можна використати дрібно-плитковий алгоритм [55-56] та високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU);

2) обчислення піддіагонального блоку  $L_{p+1,k}$  – розв’язування матричної СЛАР  $U_{k,k}^T L_{p+1,k}^T = A_{p+1,k}^T$  з нижньою трикутною матрицею;

3) обчислення наддіагонального блоку  $U_{k,p+1}$  – розв’язування матричної СЛАР  $L_{k,k}U_{k,p+1} = A_{k,p+1}$  з нижньою трикутною матрицею;

4) обчислення квадратного блоку  $G_{k,k} = -L_{p+1,k}U_{k,p+1}$ .

Обчислення пп. 2-4 (піддіагональних блоків  $L_{p+1,k}$ , наддіагональних блоків  $U_{k,p+1}$  та квадратних блоків  $G_{k,k}$ ) виконуються на нижніх рівнях паралелізму з урахуванням структури блоків використовуючи високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU).

На другому етапі виконуються наступні макрооперації:

5) модифікація діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(1)} = A_{p+1,p+1}^{(0)} + \sum_{k=1}^p G_{k,k}$ , яка виконується потоками (процесами) вищого рівня паралелізму, використовуючи операцію мультизбирання блоків  $G_{k,k}$ ;

6)  $LU$ -розвинення діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(1)} = L_{p+1,p+1}U_{p+1,p+1}$  з частковим вибором головних елементів в стовпчиках блоку  $A_{p+1,p+1}^{(1)}$ , для цього розвинення також можна використати дрібно-плитковий алгоритм та високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU).

Зауважимо, що можна також організувати паралельне виконання операцій пп. 1-4 на різних рівнях паралелізму, використовуючи дрібно-плитковий

алгоритм  $LU$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням, який реалізує цю ідею.

У випадку вихідної блочно-діагональної матриці з обрамленням значний вплив на ефективність запропонованого алгоритму має формування і подальше розв'язування так званої зведеної системи (з матрицею  $A_{p+1,p+1}^{(1)}$ ). З метою зменшення обсягу необхідних для цього обчислень доцільно оптимізувати розріджену структуру як діагональних блоків, так і блоків обрамлення.

**Паралельний блочний алгоритм розвинення симетричних додатно визначених блочно-діагональних матриць з обрамленням.** Як зазначалось вище матриці такого вигляду можна отримати, застосувавши до вихідної матриці методу паралельних перерізів. Зокрема таке переупорядкування використовується для матриць з вузькою стрічкою (тобто, якщо не виконується умова  $m_l + m_u \geq ps, p > 1$ ).

*Декомпозиція і розподіл між процесорними пристроями елементів матриці.* Враховуючи симетричність вихідної матриці, розподіляються і зберігаються лише елементи її верхнього трикутника і головної діагоналі. Розподіл даних між  $p$  паралельними потоками (процесами) вищого рівня паралелізму доцільно виконати так: потоку з порядковим номером  $k$  ( $k = 1, \dots, p$ ) розподіляються ненульові елементи блоків  $A_{k,k}, A_{k,p+1}$ , на місці яких надалі можуть розміщуватися відповідні ненульові елементи блоків матриці  $U$ , і виділяється пам'ять для верхнього трикутника (включаючи головну діагональ) квадратного блоку  $G_{kk} = -U_{k,p+1}^T U_{k,p+1}$  та (при необхідності) для блоків  $U_{k,k}, U_{k,p+1}$ . Блок  $A_{p+1,p+1}$  розподіляється одному з потоків, наприклад з порядковим номером  $p$ .

Слід зауважити, що можливості алгоритмів цієї групи також обмежені через суттєве зростання щільності при розвиненні блоків обрамлення. Тому і при реалізації цього алгоритму операції з блоками обрамлення доцільно використовувати, використовуючи нижчі рівні паралелізму.

**Алгоритм.** Таким чином,  $LL^T$ -розвинення симетричної блочно-діагональної матриці з обрамленням виконуються наступні операції ( $i = 1, \dots, p$ ):

1)  $LL^T$ -розвинення діагональних блоків  $A_{ii}$ :  $A_{i,i} = U_{i,i}^T U_{i,i}$ ;

2) обчислення позадіагональних блоків обрамлення – розв’язування матричних СЛАР з трикутними матрицями  $U_{i,i}^T U_{i,p+1} = A_{i,p+1}$ ;

3) обчислення квадратного блоку  $G_{i,i} = -U_{i,p+1}^T U_{i,p+1}$ .

4) модифікація діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(1)} = A_{p+1,p+1}^{(0)} + \sum_{i=1}^p G_{i,i}$ , яка

виконується потоками (процесами) вищого рівня паралелізму, використовуючи операцію мультизбирання блоків  $G_{i,i}$ ;

5)  $LL^T$ -розвинення діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(1)} = U_{p+1,p+1}^T U_{p+1,p+1}$ , для цього розвинення також можна використати дрібно-плитковий алгоритм та високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU).

Кожна з макрооперацій пп. 1-3 алгоритму для одного блоку не залежить від аналогічних операцій з іншими блоками і може виконуватись паралельно. Для  $LL^T$ -розвинень (пп. 1, 5) можна використати дрібно-плитковий алгоритм та високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU). Обчислення пп. 2, 3 (наддіагональних блоків  $U_{k,p+1}$  та квадратних блоків  $G_{k,k}$ ) виконуються на нижніх рівнях паралелізму з урахуванням структури блоків використовуючи високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU).

Таким чином в результаті отримуємо верхню трикутну матрицю

$$U = \begin{pmatrix} U_{11} & 0 & 0 & 0 & U_{1,p} \\ & U_{22} & 0 & 0 & U_{2,p} \\ & & U_{33} & 0 & U_{3,p} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ & 0 & & U_{p-1,p-1} & U_{p-1,p} \\ & & & & U_{p,p} \end{pmatrix}.$$

**Ефективність алгоритму.** Як зазначалось вище, ефективність розпаралелювання розв'язування СЛАР визначається ефективністю алгоритмів розвинення матриці системи.

Дослідимо ефективність гібридного варіанту (використовується архітектура з  $p$  CPU та  $p$  GPU) блочного алгоритму  $LL^T$ -розвинення симетричної блочно-діагональної матриці з обрамленням порядку  $n$ , яку отримано в результаті структурної регуляризації стрічкової симетричної матриці (на півширина стрічки якої дорівнює  $m$ ).

Використаємо позначення п. 4.3.1. Тоді справедливі наступні оцінки (за умови  $n_i + m = (n + m) / p \gg 2m$ ):  $O_1 \approx n_i m^2$ ,  $O_2 \approx 2n_i m^2$ ,  $O_3 \approx n_i m^2$ ,  $O_4 \approx 2m^2 \log_2 p$ ,  $O_5 \approx m^3(7p - 13) / 3$ . Макрооперацію п. 4 алгоритму пов'язано з операцією мультизбирання, тобто обмінами даними всередині та/або між процесорними пристроями. Якщо для цієї операції використовується алгоритм «дерева» [35], то загальний час мультизбирання (з  $p$  GPU одному GPU, включаючи синхронізації) масиву  $q$  подвійних слів можна в середньому оцінити величиною  $q(2t_{CG} + t_{CC} \log_2 p)$  (у більшості випадків часом обмінів між CPU і GPU  $t_{CG}$  можна знехтувати).

Зауважимо, що ефективність алгоритму, що розглядається, можна оцінювати, виходячи або із стрічкової (вихідної) структури матриці, або із блочно-діагональної з обрамленням. Отже, для варіанта гібридного алгоритму, що розглядається, справедливі такі оцінки ( $T_1^{(b)}$  – час  $LL^T$ -розвинення стрічкової матриці на 1 CPU і 1 GPU, використовуючи дрібно-плитковий алгоритм,  $T_1^{(p)}$  – час  $LL^T$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням з  $p$  великими діагональними блоками на 1 CPU і 1 GPU, використовуючи дрібно-плитковий алгоритм).

Якщо  $n + m \gg 2pm$ , то для гібридного блочного алгоритму  $LU$ -розвинення стрічкової симетричною матриці, яку пере упорядковано у блочно-діагональну матрицю з обрамленням, справедливі оцінки

$$T_1^{(b)} \approx nm^2 \frac{t_G}{n_o}, \quad T_1^{(p)} \approx (4n - 2m)m^2 \frac{t_G}{n_o}, \quad T_p \approx (4n + \alpha m + \tau) \frac{m^2 t_G}{p n_o},$$

$$\begin{aligned}
S_p^{(b)} &\approx \frac{p}{4} \left( 1 - \frac{\alpha m + \tau}{4n + \alpha m + \tau} \right), & E_p^{(b)} &\approx \frac{1}{4} - \frac{\alpha m + \tau}{4(4n + \alpha m + \tau)}, \\
S_p^{(p)} &\approx p \left( 1 - \frac{(\alpha + 2)m + \tau}{4n + \alpha m + \tau} \right), & E_p^{(p)} &\approx 1 - \frac{(\alpha + 2)m + \tau}{4n + \alpha m + \tau},
\end{aligned}
\tag{4.24}$$

де  $\alpha = \frac{7p^2 - 25p + 12}{3}$ ,  $\tau = 2p \log_2 p \frac{n_o t_{CC}}{t_G}$ .

Зауважимо, що умова може бути виконана шляхом підбору кількості процесорних пристроїв  $p$  верхнього рівня паралелізму (відповідно і кількості основних діагональних блоків). Оцінки (4.24) свідчать, що переупорядкування стрічкової матриці у блочно-діагональну матрицю з обрамленням і цей алгоритм доцільно використовувати за умови  $p > 4$ . На ефективність алгоритму також може впливати відношення часу мультизбирання одного подвійного слова і значення  $t_G/n_o$ .

Якщо запропонований алгоритм реалізується на комп'ютері з багатоядерними процесорами, використовуючи модель багаторівневого паралелізму, то прискорення та ефективність такого варіанта алгоритму можна оцінити тими ж формулами (4.24). При цьому:  $p$  – кількість процесів (потоків) верхнього рівня паралелізму,  $t_G = t_C$ ,  $n_o$  – кількість потоків нижнього рівня паралелізму, пов'язаних з одним потоком верхнього рівня.

Аналогічні оцінки  $S_p^{(p)}$  та  $E_p^{(p)}$  можна отримати для інших (відмінних від стрічкової) структур основних діагональних блоків, а також інших структур блоків обрамлення.

#### 4.3.5 Паралельні алгоритми розвинення блочно-діагональних матриць

В деяких ітераційних методах розв'язування задач лінійної алгебри використовується регуляризатор (передобумовлювач) – симетрична матриця блочно-діагональної структури. Матрицю такої структури, наприклад, можна отримати після відкидання позадіагональних блоків блочно-діагональної матриці з обрамленням. Або, розбивши вихідну (наприклад, стрічкову) матрицю на порівняно невелику кількість квадратних блоків (їх порядок має

значно перевищувати середню кількість елементів одному рядку профілю матриці), відкидаємо всі поза діагональні блоки.

Блочно-діагональний передобумовлювач забезпечує можливість при реалізації ітераційного процесу обчислювати поправки до наближень розв'язку шляхом одночасного і незалежного (паралельно) розв'язування СЛАР з діагональними блоками передобумовлювача, які є в загальному випадку розрідженими симетричними додатно визначеними матрицями.

Таким чином, операції, в тому числі факторизації, блочно-діагональної матриці природно розпаралелюється між потоками (процесами) вищого рівня паралелізму.

Для розпаралелювання факторизації діагональних блоків на нижчих рівнях можна використати варіанти дрібно-плиткового алгоритму розвинення розріджених матриць, які використовують один потік (CPU) вищого рівня та декілька потоків нижчого рівня (на багатоядерних комп'ютерах) або один GPU (на комп'ютерах гібридної архітектури).

**Дрібно-плиткові алгоритми розвинення розріджених матриць.** Варіанти цього алгоритму, які пропонувалися використовувати в попередньому та в цьому пунктах, використовують один потік (процес) вищого рівня паралелізму на багатоядерних комп'ютерах або один CPU на комп'ютерах гібридної архітектури.

Розглянемо такий варіант алгоритму  $LL^T$ -розвинення розрідженої симетричної матриці. Цей алгоритм по суті співпадає з блочно-циклічними алгоритмами розвинення розрідженої симетричної матриці, які описано в п. 4.3.3. Відмінність полягає в тому, що відсутнє розпаралелення на вищому рівні. Як і в п. 4.3.3 матриця розбивається на квадратні блоки порядку  $s$ .

Отже, для  $K = 1, \dots, N$  виконуються наступні макрооперації.

1) Для  $K > 1$ , використовуючи  $s$ -рангову модифікацію (4.10), обчислення верхнього трикутника діагонального блоку  $A_{11}^{(K)} = A_{K,K} - U_{K-1,K}^T U_{K-1,K}$  за умови

$U_{K-1,K} \neq 0$ ; на комп'ютері гібридної архітектури пересилання CPU цього обчисленого верхнього трикутника.

2)  $LL^T$ -розвинення діагонального блоку  $A_{11}^{(K)} = (U_{11}^{(K)})^T U_{11}^{(K)}$ ; на комп'ютері гібридної архітектури отриманий блок розвинення  $U_{11}^{(K)}$  пересилається GPU. Це розвинення доцільно виконати на CPU, використовуючи високопродуктивні програмні модулі багатопотокової бібліотеки Intel MKL.

3) Для  $K < N-1$   $s$ -рангова модифікація (4.10) ненульових блоків  $A_{I,J}$  ( $K \leq I \leq N$ ,  $K \leq J \leq M_I$ , виключаючи діагональний блок  $A_{K,K}$ ) підматриці  $A_{22}^{(K)}$ :  $A_{I,J} \leftarrow A_{I,J} - U_{K-1,I}^T U_{K-1,J}$ . Ця макрооперація виконуються за умов  $U_{K-1,I}, U_{K-1,J} \neq 0$  на нижніх рівнях паралелізму.

4) Для  $K < N-1$  обчислення ненульових блоків  $U_{K,I}$  ( $K+1 \leq I \leq N$ ) – розв'язування матричних СЛАР з нижньою трикутною матрицею:  $(U_{11}^{(K)})^T U_{K,I} = A_{K,I}$ . Ця макрооперація також виконуються на нижніх рівнях паралелізму.

Аналіз макрооперацій пп. 1-4 цього алгоритму свідчить, що більшість обчислень можна реалізувати на нижчих рівнях паралелізму, використовуючи програмні модулі для матрично-матричних (або матрично-векторних) операцій від розробників технічних засобів, наприклад, багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на співпроцесорах-прискорювачах – GPU).

Ефективність алгоритму можна підвищити, якщо виконувати  $LL^T$ -розвинення діагонального блоку (п. 2) і розсилку блоків розвинення (п. 5) одночасно (паралельно, асинхронно) із закінченням виконання  $s$ -рангових модифікацій (4.10) ненульових блоків (п. 3) попереднього кроку, використовуючи різні потоки верхнього та нижнього рівнів паралелізму або CPU і GPU на комп'ютерах гібридної архітектури. Також підвищити ефективність алгоритму можна за рахунок одночасного виконання обчислень і

обмінів даними між різними процесорними пристроями, наприклад, обміни даними (пп. 1, 2) виконувати на фоні обчислень.

Аналогічний однопотоковий дрібноплитковий алгоритм  $LU$ -розвинення розрідженої несиметричної матриці можна розробити на основі блочно-циклічного алгоритму  $LU$ -розвинення такої матриці (див. п. 4.3.2).

Ефективність таких (однопотокових) дрібноплиткових алгоритмів розвинення розріджених матриць визначається ефективністю реалізації матрично-матричних (або матрично-векторних) операцій в програмних засобах від розробників технічних засобів – багатопотокової бібліотеки Intel MKL (на багатоядерних процесорах) або бібліотеки CUBLAS (на GPU).

#### 4.3.6 Гібридні алгоритми розв’язування лінійних систем з розрідженими матрицями нерегулярної структури на основі $LL^T$ -розвинення блочно-діагональних матриць з обрамленням

Розглянемо СЛАР

$$Ax = b \quad (4.25)$$

з симетричною додатно визначеною розрідженою матрицею порядку  $n$ . Теоретичною передумовою методу розв’язання задачі з розрідженою матрицею на комп’ютерах гібридної архітектури є попереднє застосування до вихідної матриці системи методу паралельних перерізів, який приводить її до блочно-діагонального вигляду з обрамленням [39]:

$$\tilde{A} = P^T A P = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 & A_{1p} \\ 0 & A_{22} & 0 & \cdots & 0 & A_{2p} \\ 0 & 0 & A_{33} & \cdots & 0 & A_{3p} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & A_{p-1,p-1} & A_{p-1,p} \\ A_{p1} & A_{p2} & A_{p3} & \cdots & A_{p,p-1} & A_{pp} \end{pmatrix},$$

де  $P$  – матриця перестановок, а блоки  $A_{ii}, A_{ip}, A_{pi}$  зберігають розріджену структуру,  $p$  – кількість діагональних блоків у матриці. Таким чином, розв’язування вихідної задачі (4.25) зводиться до розв’язування еквівалентної задачі  $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ , де  $\tilde{x} = P^T x$ ,  $\tilde{b} = P^T b$ , тобто до системи з блочно-діагональною



матрицею з обрамленням. Найбільш ефективним прямим методом розв'язання такої задачі, як відомо, є метод Холецкого [53].

Розв'язування СЛАР з блочно-діагональною матрицею з обрамленням за методом Холецкого зводиться до виконання на кроках  $i = 1, \dots, p-1$  таких етапів обчислень:

- факторизація діагональних блоків  $A_{ii}$  за формулою

$$A_{ii} = L_{ii}L_{ii}^T ; \quad (4.26)$$

- модифікація блоків обрамлення – розв'язування СЛАР з трикутними матрицями за формулою

$$L_{ii}L_{i,p} = A_{i,p} ; \quad (4.27)$$

- обчислення добутку матриць  $L_{i,p}^T L_{i,p}$  та модифікація діагонального блоку  $A_{pp}$  за формулою

$$A_{pp}^{(m)} = A_{pp} - \sum_{i=1}^{p-1} (L_{i,p}^T L_{i,p}) ; \quad (4.28)$$

- факторизація блоку  $A_{pp}^{(m)}$  за формулою

$$A_{pp}^{(m)} = L_{pp}L_{pp}^T . \quad (4.29)$$

Оскільки кожна з перших трьох операцій для одного блоку не залежить від аналогічних операцій з іншими блоками, то на паралельному комп'ютері вони можуть виконуватись паралельно.

В результаті проведених обчислень отримуємо нижню трикутну матрицю

$$L = \begin{pmatrix} L_{11} & & & & & 0 \\ 0 & L_{22} & & & & \\ 0 & 0 & L_{33} & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \\ 0 & 0 & 0 & & L_{p-1,p-1} & \\ L_{1,p}^T & L_{2,p}^T & L_{3,p}^T & \cdots & L_{p-1,p}^T & L_{pp} \end{pmatrix} .$$

Для розв'язування системи  $Ly = b$  необхідно для  $i = 1, \dots, p-1$  виконати такі матрично-векторні операції:

- розв'язування систем  $L_{ii}y_i = b_i$  ;
- обчислення добутків  $L_{i,p}^T y_i$  ;

- модифікація  $b_p^{(m)} = b_p - \sum_{i=1}^{p-1} (L_{i,p}^T y_i)$  ;
- розв'язування системи  $L_{pp} y_p = b_p^{(m)}$  .

Для розв'язування системи  $L^T x = y$  необхідно для  $i = 1, \dots, p-1$  виконати матрично-векторні операції:

- розв'язування системи  $L_{pp}^T x_p = y_p$  ;
- модифікація  $y_i^{(m)} = y_i - (L_{i,p} x_p)$  ;
- розв'язування систем  $L_{ii}^T x_i = y_i^{(m)}$  .

**Гібридний блочний алгоритм розв'язування СЛАР на основі  $LL^T$ -розвинення** на архітектурі  $p$  CPU+ $p$  GPU складається з виконання таких кроків:

1) Декомпозиція даних:

- на GPU, що відповідають процесам CPU з логічними номерами  $(i-1), i = 1, \dots, p$ , розсилаються відповідно блоки  $A_{i,i}$ ,  $A_{i,p}$  та частини векторів  $x_i$ ,  $y_i$ ,  $b_i$ ;
- на GPU, що відповідає процесу CPU з логічним номером 0, зберігається блок  $A_{p+1,p+1}$ .

2) Реалізація  $LL^T$ -розвинення на архітектурі  $p$  CPU+ $p$  GPU:

- паралельне виконання всіма  $p$ -процесами  $LL^T$ -розвинення відповідних діагональних блоків  $A_{ii}$  ( $i = 1, \dots, p$ ) за формулою (4.26) з використанням GPU [45, 51]

- обчислення всіма  $p$  GPU відповідних блоків обрамлення  $L_{i,p+1}$ , як розв'язків матричних СЛАР, та добутоків блоків  $L_{i,p+1}^T L_{i,p+1} \equiv G_i$  згідно формули (4.27);

- копіювання у пам'ять відповідних процесів CPU блоків  $G_i$ .

- мультизбирання нульовим процесом блоків  $G_i$ , обчислення модифікованого діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(m)} = A_{p+1,p+1} - \sum_{i=1}^p G_i$ , згідно (4.28), та копіювання його у пам'ять відповідного GPU;

- $LL^T$ -розвинення діагонального блоку  $A_{p+1,p+1}^{(m)}$  на GPU нульового процесу за формулою (4.29).

3) Розв'язування системи  $Ly = b$  на архітектурі  $p$  CPU+ $p$  GPU:

- паралельне (одночасне) розв'язування всіма  $p$  GPU відповідних систем  $L_{ii}y_i$ ;
- обчислення всіма  $p$  GPU відповідних добутків блоків  $L_{i,p+1}^T y_i \equiv g_i$ ;
- копіювання у пам'ять відповідних CPU блоків  $g_i$ ;
- мультизбирання нульовим процесом блоків  $g_i$ , обчислення модифікованого блоку  $b_{p+1}^{(m)} = b_{p+1} - \sum_{i=1}^p g_i$  та копіювання його у пам'ять відповідного GPU;
- розв'язування на GPU нульового процесу системи  $L_{p+1,p+1} y_{p+1} = b_{p+1}^{(m)}$ .

4) Розв'язування системи  $L^T x = y$  на архітектурі  $p$  CPU+ $p$  GPU:

- розв'язування системи  $L_{p+1,p+1}^T x_{p+1} = y_{p+1}$  на GPU нульового процесу;
- копіювання у пам'ять нульового процесу, мультирозсилка іншим процесам та копіювання у пам'ять відповідного GPU  $x_{p+1}$ ;
- модифікація на відповідних GPU  $y_i^{(m)} = y_i - (L_{i,p+1} x_{p+1})$ ;
- розв'язування на відповідних GPU систем  $L_{ii}^T x_i = y_i^{(m)}$ .

В залежності від структури діагональних блоків використовуються гібридні алгоритми їх розвинення на одному CPU та на одному GPU для щільних, або стрічкових матриць.

Слід зазначити, що складність гібридного алгоритму факторизації одного діагонального блоку визначається в основному складовою обробки матриці на GPU.

У випадку якщо блоки  $D_{ii}$   $i = \overline{1, p-1}$  є стрічковими матрицями порядку  $q$  з півшириною стрічки  $k$ , а блок  $D_{pp}$  – щільна матриця порядку  $s$  справедливі наступні оцінки.

Кількість операцій, що виконуються на 1 GPU для знаходження  $LL^T$ -розвинення розрідженої блочно-діагональної матриці з обрамленням  $A$  оцінюється величиною

$$N_p \approx \frac{qs}{2} \left( 4q + 4k + \frac{k^2}{s} \right).$$

**Примітка.** Якщо  $k \ll q$ ,  $s \approx pk$ , то  $N_p \approx 2q^2 s$ .

Тут і надалі,  $\tau_{opp} = \frac{n_o t_{opp}}{t_g}$ ,  $\tau_{opg} = \frac{n_o t_{opg}}{t_g}$ .

Оскільки, обчислення проходять в основній своїй масі на GPU, що реалізує архітектуру SIMT (Single Instruction, Multiple Threads), то при подальших розрахунках слід враховувати, що одна інструкція виконується над групою даних. Тобто одночасно відбувається  $n_o$  операцій з плаваючою комою. Величина  $n_o$  залежить від апаратних характеристик конкретного графічного прискорювача.

Прискорення гібридного алгоритму  $LL^T$ -розвинення розрідженої блочно-діагональної матриці з обрамленням  $A$  становить

$$S_p \approx (p-1) \left( 1 + \frac{s^2 p}{2N_p} (\tau_{opp} + 2\tau_{opg}) \right)^{-1}.$$

**Примітка.** Якщо  $k \ll q$ ,  $s \approx pk$ , то

$$S_p \approx (p-1) \left( 1 + \frac{sp}{4q^2} (\tau_{opp} + 2\tau_{opg}) \right)^{-1}.$$

Запропонований алгоритм найбільш ефективний у випадках, коли діагональні блоки мають регулярну структуру і можуть представлятись як щільні, або стрічкові матриці. У такому випадку ефективність досягається за рахунок використання при обчисленнях, оптимізованих програмних бібліотек. Одним з недоліків даного алгоритму є великі об'єми пам'яті для збереження блоків обрамлення і діагональних блоків.

**Гібридний дрібно-плитковий алгоритм  $LL^T$ -розвинення блочно-діагональної матриці з обрамленням [55, 56].** Розіб'ємо матрицю  $A$  на блоки розміром  $c \times c$ . Для факторизації блочно-діагональної матриці застосуємо алгоритм запропонований в [58] для щільних матриць.

Для факторизації матриці на  $k$  кроці використаємо наступне співвідношення

$$A^k = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L_{11}^T & L_{21}^T \\ 0 & L_{22}^T \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

де розміри блоків  $A_{11} - c \times c$ ,  $A_{21} - (n - kc)c$ ,  $A_{22} - (n - kc)(n - kc)$ , блоки  $A_{21}$  та  $A_{22}$  враховують структуру блоків  $D_{ii}$ ,  $C_{pi}$ ,  $D_{pp}$ .

Звідси отримаємо алгоритм, за яким проводиться розвинення на  $k$  кроці:

$$A_{11} = L_{11} \times L_{11}^T; \quad (4.31)$$

$$L_{21} = A_{21} \times (L_{11}^T)^{-1}; \quad (4.32)$$

$$\tilde{A}_{22} = A_{22} - L_{21} \times L_{21}^T. \quad (4.33)$$

Зазначимо, що реалізація (4.31)–(4.33) на кожному кроці модифікує тільки блоки  $D_{ii}$ ,  $C_{pi}$ ,  $i = \overline{1, p-1}$ ,  $D_{pp}$ .

Для реалізації алгоритму будемо використовувати розподіл, запропонований вище. Тобто в  $\text{GPU}_i$ ,  $i = \overline{1, p-1}$  містяться блоки  $D_{ii}$ ,  $C_{pi}$  та блок  $A_{pp}^{(i)}$  того ж розміру, що й  $D_{pp}$ ; в  $\text{GPU}_p$  зберігається блок  $D_{pp}$ .

На рис. 4.4. показано блочний розподіл даних на  $k$ -му кроці факторизації блочно-діагональної матриці з обрамленням, враховуючи вище запропоновану декомпозицію.

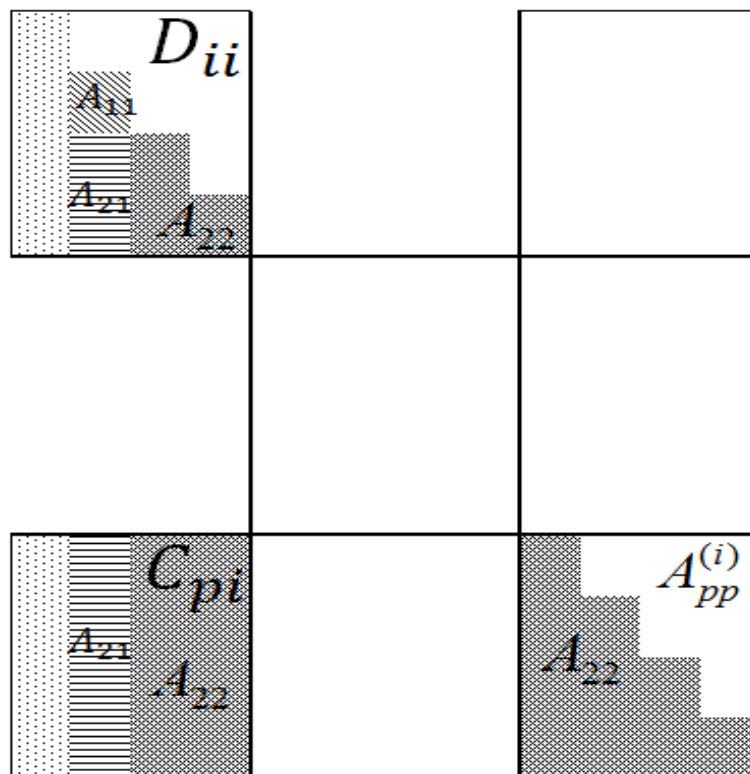


Рисунок 4.4 – Декомпозиція даних на  $\text{GPU}_i$

Паралелізація обчислень трикутної факторизації полягає в тому, що розвинення блоків  $A_{11}$  та модифікація  $A_{21}$  та  $A_{22}$  може здійснюватись незалежно у кожному  $\text{CPU}_i$  та  $\text{GPU}_i$ , де  $i = \overline{1, p-1}$ .

На кожному кроці ( $i = \overline{1, p-1}$ ) у всіх парах  $\text{CPU}_i$  та  $\text{GPU}_i$  виконуємо:

- у  $\text{CPU}_i$ , факторизуємо  $A_{11}$  із  $D_{ii}$   $A_{11} = L_{11} \times L_{11}^T$  ;
- у  $\text{GPU}_i$ , модифікуємо стовпчик блоків  $L_{21}$   $L_{21} = A_{21} (L_{11}^T)^{-1}$  ;
- у  $\text{GPU}_i$ , модифікуємо блоки матриці  $A_{22}$  з  $A_{pp}^{(i)}$  за формулою

$$\tilde{A}_{22} = A_{22} - L_{21} L_{21}^T .$$

- У  $\text{CPU}_p$ , використовуючи мультизбирання, модифікуємо  $D_{pp}$

$$D_{pp}^* = D_{pp} - \sum_{i=1}^{p-1} A_{pp}^{(i)} .$$

Після цього факторизуємо блок  $D_{pp}^*$ , тим самим завершуючи процес факторизації матриці.

Кількість операцій, що виконуються на 1 GPU для знаходження факторизації розрідженої блочно-діагональної матриці з обрамленням оцінюється величиною

$$N_p \approx \frac{q^3}{3} + sq^2 = \frac{q^2}{3} (q + 3s) .$$

Прискорення дрібно-плиткового гібридного алгоритму  $LL^T$ -розвинення розрідженої блочно-діагональної матриці з обрамленням  $A$ , становить

$$S_p \approx (p-1) \left( 1 + \frac{3(p-1)s^2}{2q^2(q+3s)} \left( \tau_{opp} + \left( \frac{2p}{(p-1)} + \frac{4qc}{s^2} + \frac{4c}{(p-1)s} \right) \tau_{opg} \right) \right)^{-1} ,$$

де  $c$  – розмір плитки.

Цей алгоритм має низку переваг над алгоритмом факторизації запропонованим вище. Можна регулювати розмір блоку, з яким проводяться обчислення на кожному кроці алгоритму, за рахунок цього може досягатись ефект кешизації обчислень, коли блоки повністю розміщуються у швидкій пам'яті GPU. Також така блочна структура дозволяє працювати з нерозривними

масивами даних на GPU, що зменшує кількість індексних операцій і перевірок, які на графічному прискорювачі є досить затратними.

#### 4.4. Експериментальне дослідження паралельних алгоритмів.

Було проведено апробацію розроблених паралельних алгоритмів на комп'ютері MIMD-архітектури з багатоядерними процесорами, а також на гібридному комп'ютері. Зокрема в якості тестових було використано СНР із стрічковими матрицями Якобі, які виникають при математичному моделюванні нанопористих систем [37].

В таблиці наведено деякі результати розв'язування тестових СНР із стрічковими матрицями Якобі, які виникають при математичному моделюванні досліджуваних систем.

Таблиця. 4.1

№ п/п	Параметри матриці Якобі		Час розв'язування		
	порядок	напівширина стрічки	послідовний алгоритм	паралельний алгоритм	гібридний алгоритм
1	55 650	1 052	≈ 84 год.	≈ 4 год.	≈ 2 год.
2	52 500	1 052	≈ 84 год.	5 год. 42 хв.	1 год. 12 хв.

Результати апробації засвідчили, що розроблені паралельні алгоритми добре масштабуються. Також забезпечується більш висока продуктивність для СНР більш високих порядків з матрицями Якобі з більшою шириною стрічки за рахунок підвищення використання обчислювального ресурсу.

Додатково для тестування запропонованих в розділі алгоритмів розв'язування СЛАР із стрічковими матрицями було використано декілька СЛАР параметри яких представлено в табл. 4.2.

В табл. 4.3 наведено часи розв'язування СЛАР, параметри яких приведено в табл. 4. 2, на комп'ютерах різної архітектури, використовуючи різні алгоритми. Тут в якості персонального комп'ютера (позначено ПК) переважно використовувався комп'ютер з процесором 1 Intel Core I7 4 core, на кластері Інпарком встановлено багатоядерні процесори Intel Xeon 5606 4 core, а на

кожному з чотирьох вузлів Інпарком\_g встановлено 2 таких же процесори та 2 відеокарти Nvidia Tesla M2090. Кластери сімейства Інпарком – спільна розробка Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України та ДНВП "Електронмаш".

Таблиця 4.2.

№ п/п	Назва	Порядок $n$	Кількість піддіагоналей $m_l$	Кількість наддіагоналей $m_u$
1	A-126-20	126 000	2 001	2 001
2	A-126-09	126 000	902	902
3	A-055-10	55 650	1 052	1 052
4	A-052-10	52 500	1 052	1 052
5	A-137-44	137 826	4 448	4 448

Таблиця 4.3.

Матриця СЛАР	Час розв'язування (сек.)		
	послідовний алгоритм	паралельний алгоритм	гібридний алгоритм
	ПК	Інпарком	Інпарком_g
A-126-20	≈ 2 240	62,32	
A-126-09	≈ 660	11,11	
A-055-10	≈ 170	7,08	3,96
A-052-10	≈ 210	14,28	2,93
A-137-44	≈ 7 080	202,70	

Наведені результати засвідчили, що використання паралельних обчислень дозволяє суттєво скоротити час розв'язування задач – від 15 до 60 раз. А використання комп'ютера гібридної архітектури скорочує час ще в 2-5 раз.



Дослідження створених гібридних алгоритмів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями проводилось на гібридному комп'ютері СКІТ-4. Програми написано на алгоритмічній мові С з використанням систем розпаралелення MPI та CUDA [60]. Також використовувалися функції програмних бібліотек Intel MKL [40], cuBLAS [41], cuSPARSE [61].

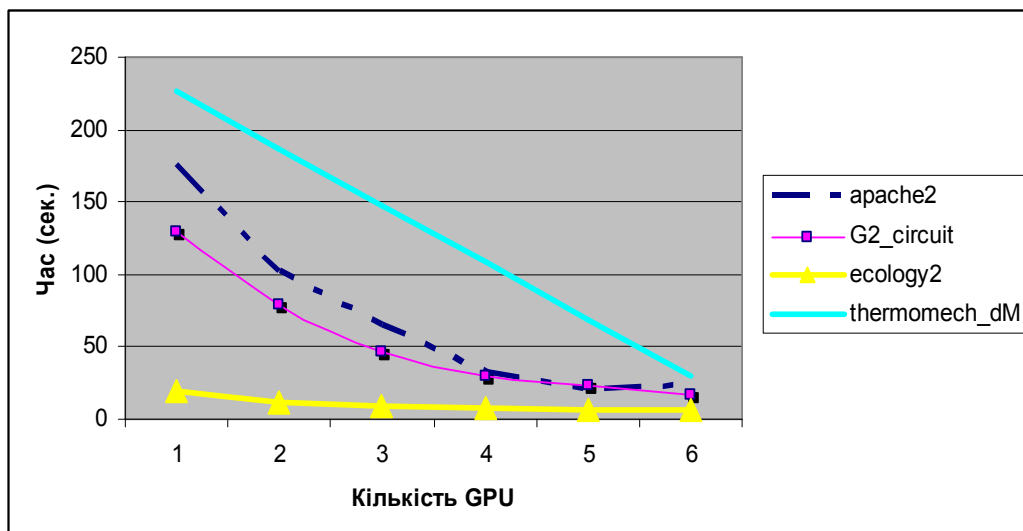
В табл. 4.4 представлено тестові матриці, на яких проводились чисельні експерименти розроблених гібридних алгоритмів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями.

Таблиця 4.4 – Тестові матриці для дослідження гібридних алгоритмів розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями

№ п./п.	Назва	Проблемна область	Порядок матриць	Кількість ненульових елементів
1.	ecology2	2D/3D problem	999999	49591
2.	apache2	structural problem	715176	4817870
3.	thermomech_dM	thermal problem	20416	1423116
4.	G2_circuit	circuit simulation problem	150102	726624
5.	Dubcova3	2D/3D problem	146689	3636643
6.	cvxbqp1	optimization problem	50000	349968
7.	minsurfo	optimization problem	40806	203622

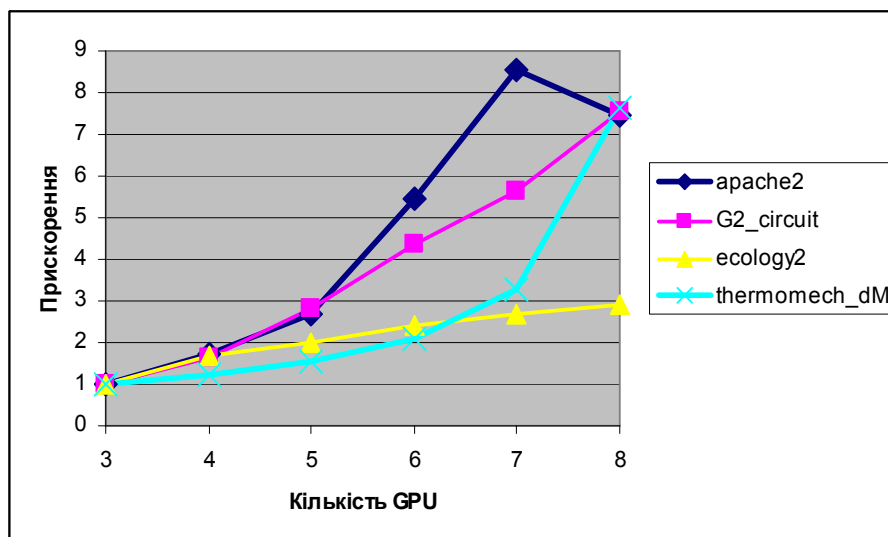
На рис. 4.5 показано залежність часу розв'язування СЛАР з розрідженими матрицями від кількості використаних GPU. Для розв'язання СЛАР з розрідженими матрицями, за номерами 1, 2, 6, 7 використовувалась програма, яка реалізує гібридний блочний алгоритм  $LL^T$ -розвинення блочно-діагольних матриць з обрамленням, а для матриць за номерами 3, 4, 5 розрахунки проводились

програмою, що реалізує дрібно-плитковий алгоритм  $LL^T$ -розвинення блочно-діагональних матриць з обрамленням.



**Рисунок 4.5**– Часи розв’язування СЛАР гібридними алгоритмами  $LL^T$ -розвинення блочно-діагональних матриць з обрамленням

На рис. 4.6 подано графіки прискорення гібридних алгоритмів розв’язування СЛАР з розрідженими матрицями на основі  $LL^T$ -розвинення блочно-діагональних матриць з обрамленням.



**Рисунок 4.6** – Прискорення гібридних алгоритмів розв’язування СЛАР з розрідженими матрицями на основі  $LL^T$ -розвинення

Висновки по р.4. Використовуючи багаторівневу модель паралельних обчислень з урахуванням особливостей архітектури комп'ютера розроблено ефективні алгоритми та програми розв'язування СНР та СЛАР на паралельних комп'ютерах гібридної архітектури та з процесорами Intel Xeon Phi серії x200. При цьому час розв'язування задач суттєво скорочується, що дає можливість розв'язувати задачі високих порядків в реальному часі, які висуває сучасне життя перед наукою.

В цьому розділі розроблено та досліджено нові гібридні алгоритми та програми прямих методів для розріджених матриць різної структури на основі методів  $LU$ ,  $LL^T$  -розвинень матриць.

Експериментальні дослідження свідчать про високу ефективність та масштабованість створених алгоритмів. Ці алгоритми та програми увійшли до складу інтелектуальної системи комп'ютерної математики та були використані при математичному моделюванні широкого класу фізико-технологічних процесів при створенні конструкцій об'єктів енергетики.

## Розділ 5. Методи інтегральних перетворень для побудови гібридних моделей АНР-рухів

### 5.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є із спектральним параметром для однорідних областей

#### 5.1.1. Скінченне інтегральне перетворення Фур'є для обмежених середовищ

Скінченне інтегральне перетворення Фур'є на множині  $I_1 = \{x : x \in [l_0, l_1]; l_0 \geq 0, l_1 < \infty\}$  запроваджено і математично обґрунтовано в [12].

При цьому крайові умови мають вигляд:

$$B_{jk}[u] \equiv \left[ \left( \alpha_{jk} \frac{d}{dx} + \beta_{jk} \right) u \Big|_{x=l_k} \right] = g_k, |\alpha_{jk}| + |\beta_{jk}| \neq 0; j, k = 1, 2.$$

Така структура крайових операторів припускає, що на межах середовища масообмін відбувається при постійних градієнтах, тобто задаються стаціонарні режими руху. Для врахування швидкостей зміни градієнтів визначальних (основних) параметрів АНР і їх градієнтів при формулюванні крайових задач, що є математичними описами розглядуваного переносу в крайових умовах присутній оператор  $\frac{\partial}{\partial t}$  або  $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$  (для динамічних задач). Це приводить до появи спектрального параметра в крайових умовах відповідної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Скінченне інтегральне перетворення Фур'є побудуємо з використанням ядра Коші - фундаментального розв'язку задачі Коші для рівняння при однорідній крайовій умові. Розглянемо крайову задачу побудови обмеженого в області  $D = \{(t, x) : t \in (0, \infty), x \in (l_0, l_1); l_0 \geq 0, l_1 < \infty\}$  розв'язку рівняння параболічного типу [20]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, a > 0, \gamma^2 \geq 0 \quad (5.1)$$

за початковою умовою

$$u(t, x) \Big|_{t=0} = g(x) \quad (5.2)$$

та крайовими умовами

$$\begin{aligned} \left[ \left( \alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{x=l_0} &= 0 \\ \left[ \left( \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{x=l_1} &= 0. \end{aligned} \quad (5.3)$$

$$\begin{aligned} \beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 &\neq 0, \alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 \neq 0, \\ \left( |\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0, \delta_{11}^m \geq 0, \gamma_{11}^m \geq 0, m = 0, 1 \right). \end{aligned}$$

В припущенні, що функція  $u(t, x)$  є оригіналом за Лапласом щодо аргумента  $t$  [29]. У зображенні за Лапласом

$$L[u] = \int_0^{\infty} u(t, x) e^{-pt} dt \equiv u^*(p, x) \quad (5.4)$$

отримуємо задачу побудови на сегменті  $[l_0, l_1]$  розв'язку неоднорідного модифікованого диференціального рівняння Фур'є

$$\frac{d^2 u^*}{dx^2} - q^2 u^* = -\bar{g}(x); \bar{g} = a^{-2} g, q^2 = a^{-2} (p + \gamma^2), \gamma^2 \geq 0 \quad (5.5)$$

за крайовими умовами

$$\left( \bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) u^* \Big|_{x=l_0} = \phi_1^0(l_0), \left( \bar{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) u^* \Big|_{x=l_1} = \phi_1^1(l_1). \quad (5.6)$$

Тут:

$$\bar{\alpha}_{11}^m = \alpha_{11}^m + \delta_{11}^m p, \bar{\beta}_{11}^m = \beta_{11}^m + \gamma_{11}^m p; \phi_1^0(l_0) = \delta_{11}^0 g'(l_0) + \gamma_{11}^0 g(l_0), \phi_1^1(l_1) = \delta_{11}^1 g'(l_1) + \gamma_{11}^1 g(l_1).$$

Вважаємо, що  $\phi_1^0(l_0) = 0, \phi_1^1(l_1) = 0$ . У протилежному випадку покладемо  $g(x) = \phi(x) + ax + b$  й обчислимо коефіцієнти  $a, b$  із алгебраїчної системи:

$$\begin{cases} (\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) a + \gamma_{11}^0 b = \phi_1^0 \\ (\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) a + \gamma_{11}^1 b = \phi_1^1 \end{cases} \quad (5.7)$$

Звідси випливає, що при  $\delta_0 \equiv \delta_{11}^0 \gamma_{11}^1 - \delta_{11}^1 \gamma_{11}^0 - \gamma_{11}^0 \gamma_{11}^1 (l_1 - l_0) \neq 0$ ,  
 $a = (\phi_1^0 \gamma_{11}^1 - \phi_1^1 \gamma_{11}^0) \delta_0^{-1}, b = [(\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) \phi_1^1 - (\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) \phi_1^0] \delta_0^{-1}$ .

У результаті одержуємо функцію

$$\varphi(x) = g(x) + \frac{\gamma_{11}^0 \phi_1^1 - \gamma_{11}^1 \phi_1^0}{\delta_0} x + \frac{(\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) \phi_1^0 - (\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) \phi_1^1}{\delta_0},$$

для якої виконуються рівності  $[\delta_{11}^0 \varphi'(x) + \gamma_{11}^0 \varphi(x)]_{x=l_0} = 0, [\delta_{11}^1 \varphi'(x) + \gamma_{11}^1 \varphi(x)]_{x=l_1} = 0$ .

Фундаментальну систему розв'язків для відповідного (5.5) однорідного рівняння утворюють функції  $chqx$  та  $shqx$  [12]. Визначимо функції:

$$V_{jk}^{m1}(ql_m) \equiv \left( \tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) chqx \Big|_{x=l_m} = \tilde{\alpha}_{jk}^m q shql_m + \tilde{\beta}_{jk}^m chql_m,$$

$$V_{jk}^{m2}(ql_m) \equiv \left( \tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) shqx \Big|_{x=l_m} = \tilde{\alpha}_{jk}^m q chql_m + \tilde{\beta}_{jk}^m shql_m,$$

$$\Phi_{jk}^m(ql_m, qx) = V_{jk}^{m2}(ql_m) chq_m x - V_{jk}^{m1}(ql_m) shq_m x.$$

Загальний розв'язок крайової задачі (5.5) - (5.7) має структуру

$$u^*(p, x) = \int_{l_0}^l H^*(p, x, \xi) \tilde{g}(\xi) d\xi \quad (5.8)$$

Тут  $H^*(p, x, \xi)$  фундаментальна функція (функція Коші) крайової задачі (5.5) - (5.7), що володіє такими властивостями [12]:

1) при  $x \neq \xi$ :  $\left( \frac{d^2}{dx^2} - q^2 \right) \square^*(p, \xi, \xi) \equiv 0$ ;

2) при  $x = \xi$ :

а)  $\square^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi+0} - \square^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi-0} = 0$  (5.9)

б)  $\frac{d}{dx} \square^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi+0} - \frac{d}{dx} \square^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi-0} = -1$

3)  $\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) H^*(p, x, \xi) \Big|_{x=l_0} = 0$ ;  $\left( \tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) H^*(p, x, \xi) \Big|_{x=l_1} = 0$ . (5.10)

Якщо, використовуючи фундаментальну систему розв'язків, покласти

$$H^*(p, x, \xi) = \begin{cases} H^{-*}(p, x, \xi) \equiv A_1 chqx + B_1 shqx, & l_0 < x < \xi < l_1 \\ H^{+*}(p, x, \xi) \equiv A_2 chqx + B_2 shqx, & l_0 < \xi < x < l_1 \end{cases}, \quad (5.11)$$

то умови (5.9), (5.10) для визначення  $A_j$  та  $B_j$  дають алгебраїчну систему з чотирьох рівнянь:

$$\begin{aligned} (A_2 - A_1) chq\xi + (B_2 - B_1) shq\xi &= 0 \\ (A_2 - A_1) shq\xi + (B_2 - B_1) chq\xi &= -q^{-1} \\ A_1 V_{11}^{01}(ql_0) + B_1 V_{11}^{02}(ql_0) &= 0 \\ A_2 V_{11}^{11}(ql_1) + B_2 V_{11}^{12}(ql_1) &= 0 \end{aligned} \quad (5.12)$$

З перших двох рівнянь системи (5.12) знаходимо співвідношення:

$$A_2 - A_1 = q^{-1} shq\xi, \quad B_2 - B_1 = -q^{-1} chq\xi.$$

Поклавши одержані співвідношення для  $A_2, B_2$  в третє та четверте рівняння системи (5.12), отримаємо систему для визначення  $A_1$  та  $B_1$

$$\begin{cases} A_1 V_{11}^{01}(ql_0) + B_1 V_{11}^{02}(ql_0) = 0 \\ A_1 V_{11}^{11}(ql_1) + B_1 V_{11}^{12}(ql_1) = q^{-1} \Phi_{11}^1(ql_1, q\xi) \end{cases} \quad (5.13)$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі: визначник алгебраїчної системи (5.13)

$$\Delta^*(p) \equiv V_{11}^{01}(ql_0) V_{11}^{12}(ql_1) - V_{11}^{02}(ql_0) V_{11}^{11}(ql_1) \neq 0 \quad (5.14)$$

для  $p = \sigma + i\tau$  з  $\text{Re } p = \sigma \geq \sigma_0$ , де  $\sigma_0$  – абсциса збіжності інтеграла Лапласа, та  $\text{Im } p = \tau \in (-\infty, +\infty)$ .

При виконанні умови розв'язності (5.14) із системи (5.13) однозначно знаходимо, що  $A_1 = -\frac{V_{11}^{02}(ql_0)}{q\Delta^*(p)} \Phi_{11}^1(ql_1, q\xi)$ ,  $B_1 = \frac{V_{11}^{01}(ql_0)}{q\Delta^*(p)} \Phi_{11}^1(ql_1, q\xi)$ .

Цим функція Коші визначена й внаслідок симетрії відносно діагоналі  $x = \xi$  має структуру:

$$\square^*(p, x, \xi) = -\frac{1}{q\Delta^*(p)} \begin{cases} \Phi_{11}^0(ql_0, qx) \Phi_{11}^1(ql_1, q\xi), & l_0 < x < \xi < l_1 \\ \Phi_{11}^0(ql_0, q\xi) \Phi_{11}^1(ql_1, qx), & l_0 < \xi < x < l_1 \end{cases} \quad (5.15)$$

Повертаючись в формулі (5.8) до оригіналу, маємо розв'язок задачі (5.1) - (5.3):

$$u(t, x) = \int_{l_0}^{l_1} \square(t, x, \xi) g(\xi) \sigma d\xi, \quad \sigma = a^{-2} \quad (5.16)$$

Тут за означенням [29]

$$H(t, x, \xi) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} H^*(p, x, \xi) e^{pt} dp \quad (5.17)$$

Обчислимо коректний для досліджень вираз інтегралу (5.17).

Покладемо  $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$ , тобто  $p = -(\beta^2 + \gamma^2)$ . Тоді одержуємо, що

$$q = ia^{-1}\beta \equiv i\bar{\beta}, \quad \text{ch } qx = \cos \bar{\beta}x, \quad \text{sh } qx = i \sin \bar{\beta}x,$$

$$V_{jk}^{m1}(i\bar{\beta}l_m) = -\bar{\alpha}_{jk}^m \bar{\beta} \sin \bar{\beta}l_m + \bar{\beta}_{jk}^m \cos \bar{\beta}l_m \equiv \bar{v}_{jk}^{m1}(\beta),$$

$$V_{jk}^{m2}(i\bar{\beta}l_m) = i[\bar{\alpha}_{jk}^m \bar{\beta} \cos \bar{\beta}l_m + \bar{\beta}_{jk}^m \sin \bar{\beta}l_m \equiv i\bar{w}_{jk}^{m2}(\beta)],$$

$$\Delta^*(p) \Big|_{p=-(\beta^2+\gamma^2)} \equiv i\bar{\delta}(\beta) = i[\tilde{v}_{11}^{01}(\beta)\tilde{v}_{11}^{12}(\beta) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta)\tilde{v}_{11}^{11}(\beta)];$$

$$\tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m(\beta^2 + \gamma^2), \quad \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m(\beta^2 + \gamma^2); m = 0, 1.$$

Розглянемо трансцендентне рівняння

$$\tilde{\delta}(\beta) \equiv \tilde{v}_{11}^{01}(\beta)\tilde{v}_{11}^{12}(\beta) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta)\tilde{v}_{11}^{11}(\beta) = 0. \quad (5.18)$$

**Теорема 5.1.1.** (про дискретний спектр): корені  $\beta_m$  трансцендентного рівняння (5.18) утворюють дискретний спектр: корені різні, дійсні, симетричні відносно  $\beta = 0$  на півосі  $\beta > 0$ , утворюють монотонно зростаючу числову послідовність з єдиною граничною точкою  $\beta = +\infty$ .

**Доведення:** При  $\delta_{11}^0 = 0, \gamma_{11}^0 = 0, \delta_{11}^1 = 0, \gamma_{11}^1 = 0$  корені  $\beta_m$  трансцендентного рівняння (5.20) утворюють дискретний спектр: корені різні, дійсні, симетричні відносно  $\beta = 0$  на півосі  $\beta > 0$ , утворюють монотонно зростаючу числову послідовність з єдиною граничною точкою  $\beta = +\infty$ . Повторюючи міркування [12], приходимо до висновку, що корені  $\beta_m$  трансцендентного рівняння (5.18) утворюють дискретний спектр.

Оскільки для функції  $H^*(p, x, \xi)$  точки  $p_n = -(\beta_n^2 + \gamma^2)$  є простими полюсами, то за узагальненою теоремою розвинення [29] отримуємо, що

$$H^*(p, x, \xi) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{V_0(x, \beta_n)V_0(\xi, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|^2}. \quad (5.19)$$

У формулі (5.19) бере участь спектральна функція

$$V_0(x, \beta_n) = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \sin \frac{x}{a} \beta_n - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \cos \frac{x}{a} \beta_n \equiv \tilde{\beta}_{11}^0 \sin \bar{\beta}_n(x - l_0) - \tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{\beta}_n \cos \bar{\beta}_n(x - l_0), \quad (5.20)$$

квадрат норми якої:

$$\|V_0(x, \beta_n)\|_1^2 = -\tilde{\beta}_n \frac{\tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n)} \left[ \left( \frac{1}{i} \frac{d}{dp} \Delta^*(p) \right) \Big|_{p=p_n} \right] \equiv$$

$$\int_{l_0}^{l_1} [V_0(x, \beta_n)]^2 \sigma dx + \frac{\alpha^{-2}}{\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} (\delta_{11}^0 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_0(l_0, \beta_n))^2 + \quad (5.21)$$

$$+ \frac{\alpha^{-2}}{\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} (\delta_{11}^1 V_0'(l_1, \beta_n) + \gamma_{11}^1 V_0(l_1, \beta_n))^2$$

Мають місце твердження.



**Теорема 5.1.2.** (про спектральну функцію) Функція  $V_0(x, \beta_n)$ , визначена формулою (5.21) є спектральною функцією задачі Штурма-Ліувілля:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + a^{-2}\beta_n^2\right)u(x, \beta_n) = 0 \quad (5.22)$$

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0\right)u\Big|_{x=l_0} = 0, \left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1\right)u\Big|_{x=l_1} = 0. \quad (5.23)$$

**Доведення:** Оскільки  $\frac{d^2}{dx^2} \sin \bar{\beta}_n(x-l_0) = -\bar{\beta}_n^2 \sin \bar{\beta}_n(x-l_0)$ ,

$$\frac{d^2}{dx^2} \cos \bar{\beta}_n(x-l_0) = -\bar{\beta}_n^2 \cos \bar{\beta}_n(x-l_0), \quad \text{то} \quad \frac{d^2}{dx^2} V_0(x, \beta_n) = -\bar{\beta}_n^2 \cdot V_0(x, \beta_n) = -a^{-2}\beta_n^2 \cdot V_0(x, \beta_n),$$

тобто рівняння (5.24) справджується.

Безпосередньо маємо

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0\right)V_0(x, \beta_n)\Big|_{x=l_0} = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \equiv 0,$$

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1\right)V_0(x, \beta_n)\Big|_{x=l_1} = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \equiv 0$$

внаслідок тотожності  $\delta(\beta_n) \equiv 0$ .

Тотожність  $\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n)\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \equiv 0$  дозволяє спектральну функцію переписати у вигляді

$$\begin{aligned} V_0(x, \beta_n) &= \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left( \tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \frac{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)} \sin \bar{\beta}_n x \right) = \\ &= \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left( \tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x - \tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x \right) \equiv \\ &\equiv \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left[ \tilde{\beta}_{11}^1 \sin \bar{\beta}_n(l_1 - x) - \tilde{\alpha}_{11}^1 \bar{\beta}_n \cos \bar{\beta}_n(l_1 - x) \right] \end{aligned} \quad (5.24)$$

Із рівностей (5.20), (5.24) маємо:

$$V_0(l_0, \beta_n) = -\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}; \quad V_0(l_1, \beta_n) = -\tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{\beta}_n \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \equiv -\tilde{\alpha}_{11}^0 a^{-2} \beta_n \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}.$$

На підставі трансцендентного рівняння (5.18) та рівностей (5.20), (5.24) можна отримати квадрат норми спектральної функції  $V_0(l_0, \beta_n)$ :

$$\|V_0(l_0, \beta_n)\|^2 = \int_{l_0}^{l_1} [V_0(l_0, \beta_n)]^2 \sigma dx = \frac{1}{2a^2} \left[ \left( \frac{\tilde{\alpha}_{11}^0}{a} \beta_n \right)^2 + (\tilde{\beta}_{11}^0)^2 (l_1 - l_0) + \tilde{\alpha}_{11}^0 \tilde{\beta}_{11}^0 + \tilde{\alpha}_{11}^1 \tilde{\beta}_{11}^1 \frac{(\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n))^2}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \right]. \quad (5.25)$$

Внаслідок рівності (5.19) розв'язком крайової задачі (5.1)-(5.3) є функція

$$\square \bar{u}(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_1^2} \int_{l_0}^{l_1} g(\xi) V_0(\xi, \beta_n) \sigma d\xi. \quad (5.26)$$

Звідси внаслідок початкової умови одержуємо при  $t=0$  інтегральне зображення функції  $g(x)$ :

$$\bar{g}(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_1^2} \int_{l_0}^{l_1} g(\xi) V_0(\xi, \beta_n) \sigma d\xi. \quad (5.27)$$

Оскільки система функцій  $\{V_0(x, \beta_n)\}_{n=1}^{\infty}$  є ортогональною в розумінні  $\|\cdot\|_1$ , повна й замкнута [12], то рівність (5.27) є рядом Фур'є для функції  $g(x)$ . Наслідком цих міркувань є наступна теорема:

**Теорема 5.1.3** (про розвинення в ряд Фур'є): Якщо функція  $g(x) \in C^{(3)}(l_0, l_1)$  і задовольняє крайові умови

$$B_0[g] \equiv \left\{ \left[ \alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \left( a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2 \right) \right] \frac{d}{dx} + \gamma_{11}^0 \left( a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2 \right) + \beta_{11}^0 \right\} g(x) \Big|_{x=l_0} = 0, \quad (5.28)$$

$$B_1[g] \equiv \left\{ \left[ \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \left( a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2 \right) \right] \frac{d}{dx} + \gamma_{11}^1 \left( a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2 \right) + \beta_{11}^1 \right\} g(x) \Big|_{x=l_1} = 0, \quad (5.29)$$

то вона зображається абсолютно й рівномірно збіжним рядом Фур'є (5.27).

Ряд Фур'є визначає пряме

$$F_n[g(x)] = \int_{l_0}^{l_1} g(x) V_0(x, \beta_n) \delta dx \equiv g_n \quad (5.30)$$

та обернене

$$F_n^{-1}[g_n] = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_1^2} \equiv g(x) \quad (5.31)$$

скінченне інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром в крайових умовах.

**Теорема 5.1.4** (про основну тотожність): Якщо функція  $g(x) \in C^{(3)}(l_0, l_1)$  й задовольняє крайові умови

$$B_0[g] = g_0, \quad B_1[g] = g_1, \quad (5.32)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Фур'є  $B = a^2 \frac{d^2}{dx^2}$ :

$$\begin{aligned} F_n \left[ a^2 \frac{d^2}{dx^2} g(x) \right] &= -\beta_n^2 g_n + (\tilde{\alpha}_{11}^1)^{-1} V_0(l_1, \beta_n) g_1 - (\tilde{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_0(l_0, \beta_n) g_0 \equiv -\beta_n^2 g_n - \bar{\beta}_n \frac{u_{11}^{01}(\beta_n)}{u_{11}^{11}(\beta_n)} g_1 + \beta_0 g_0 \equiv \\ &\equiv -\beta_n^2 g_n + (\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0)^{-1} \left[ \delta_{11}^0 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_0(l_0, \beta_n) \right] + \\ &\quad + (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \delta_{11}^1 \beta_{11}^1)^{-1} \left[ \delta_{11}^1 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^1 V_0(l_0, \beta_n) \right] \end{aligned} \quad (5.33)$$

**Доведення:** Тотожність (5.33) встановлюється безпосередньо методом інтегрування два рази частинами під знаком інтеграла з наступним використанням властивостей функцій  $g(x)$  та  $V_0(x, \beta_n)$ .

### 5.1.2. Інтегральні перетворення Фур'є для напівобмеженого однорідного середовища

Інтегральне перетворення Фур'є для напівобмеженого однорідного середовища пов'язане із крайовим оператором  $B = -h_1 \frac{\partial}{\partial x} + h_2$ ,  $h_1 \geq 0$ ,  $h_2 \geq 0$ ,  $h_1 + h_2 \neq 0$  побудовано й математично обґрунтовано в [12]. Побудуємо його з використанням ядра Коші як фундаментального розв'язку задачі Коші для параболічного рівняння при однорідній крайовій умові.

Розглянемо задачу побудови обмеженого в області  $D^+ = \{(t, x) : t \in (0, \infty), x \in (0, \infty)\}$  розв'язку диференціального рівняння другого порядку [20]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, a > 0, \gamma^2 \geq 0 \quad (5.34)$$

за початковою умовою

$$u(t, x)|_{t=0} = g(x) \quad (5.35)$$

та крайовими умовами:

$$\left[ \left( \alpha_{11}^0 + \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{x=0} = 0, \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=\infty} = 0. \quad (5.36)$$

Вважаємо, що  $\alpha_{11}^0 \leq 0$ ,  $\beta_{11}^0 \geq 0$ ,  $\delta_{11}^0 \geq 0$ ,  $\gamma_{11}^0 \geq 0$ ,  $|\alpha_{11}^0| + \beta_{11}^0 \neq 0$ ,  $\delta_{11}^0 g'(0) + \gamma_{11}^0 g(0) = 0$ .

Припустимо, що функція  $u(t, x)$  є оригіналом за Лапласом щодо змінної  $t$  [29]. У зображенні за Лапласом маємо задачу побудови обмеженого в  $D^+$  розв'язку рівняння:

$$\frac{d^2 u^*}{dx^2} - q^2 u^* = -\bar{g}(x); \bar{g} = a^{-2} g, q^2 = a^{-2}(p + \gamma^2), \gamma^2 \geq 0 \quad (5.37)$$

за крайовими умовами

$$\left( \bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) u^*(p, x) \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{du^*}{dx} \Big|_{x=\infty} = 0. \quad (5.38)$$

Зафіксуємо ту гілку двозначної функції  $q = a^{-1}(p + \gamma^2)^{1/2}$ , на якій  $\Re eq > 0$ . Безпосередньо перевіряється, що розв'язком крайової задачі (5.37), (5.38) є функція:

$$u^*(p, x) = \int_{l_0}^l E^*(p, x, \xi) \tilde{g}(\xi) d\xi \quad (5.39)$$

У формулі (5.39) бере участь фундаментальна функція крайової задачі (5.37), (5.38) [12]

$$E^*(p, x, \xi) = \frac{e^{-q|x-\xi|}}{2q} + \frac{\bar{\alpha}_{11}^0 q + \bar{\beta}_{11}^0}{\bar{\alpha}_{11}^0 q - \bar{\beta}_{11}^0} \frac{e^{-q|x+\xi|}}{2q}. \quad (5.40)$$

Особливими точками функції  $E^*(p, x, \xi)$  є точки розгалуження  $p = -\gamma^2$  та  $p = \infty$ . Внаслідок леми Жордана і теореми Коші [29] отримуємо формулу обчислення оригіналу фундаментальної функції:

$$E(t, x, \xi) = L^{-1}[E^*] \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} E^*(p, x, \xi) e^{pt} dp \equiv -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Im} \left[ E^*(e^{\pi i}(\gamma^2 + \beta^2), x, \xi) \right] e^{-(\gamma^2 + \beta^2)t} \beta d\beta. \quad (5.41)$$

Ми поклали  $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$ , тобто  $p = (\beta^2 + \gamma^2) \exp \pi i = -(\beta^2 + \gamma^2)$ . При цьому  $dp = -2\beta d\beta$ .

Визначимо спектральну функцію

$$V(x, \beta) = \tilde{\beta}_{11}^0 \sin \bar{b}x - \tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{b} \cos \bar{b}x$$

і спектральну густину  $\tilde{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 - \gamma_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2)$

$$\Omega(\beta) = b^{-1} \beta \left( [\tilde{\beta}_{11}^0]^2 + \bar{b}^2 [\tilde{\alpha}_{11}^0]^2 \right)^{-1}, \quad \bar{b} = a^{-1} \beta, \quad \tilde{\alpha}_{11}^0 = \alpha_{11}^0 - \delta_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2), \quad \tilde{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 - \gamma_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2).$$

Згідно формули (5.41) маємо:

$$E(t, x, \xi) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-(\gamma^2 + \beta^2)t} V(x, \beta) V(\xi, \beta) \Omega(\beta) d\beta \sigma a^2. \quad (5.42)$$

Розв'язком параболічної крайової задачі масопереносу (5.34) - (5.36) є функція:

$$u(t, x) = L^{-1} [u^*(p, x)] = \int_0^{\infty} E(t, x, \xi) g(\xi) \sigma d\xi \quad \sigma = a^{-2}. \quad (5.43)$$

Внаслідок початкової умови (5.34) одержуємо інтегральне зображення:

$$g(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \int_0^{\infty} g(\xi) V(\xi, \beta) \sigma d\xi. \quad (5.44)$$

Інтегральне зображення (5.44) для напівобмеженої області  $x \geq 0$  породжує пряме:

$$F_+ [g(x)] = \int_0^{\infty} g(x) V(x, \beta) \sigma dx \equiv \tilde{g}(\beta). \quad (5.45)$$

та обернене:

$$F_+^{-1} [\tilde{g}(\beta)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{g}(\beta) V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \equiv g(x). \quad (5.46)$$

інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром.

Результатом цих міркувань є справедливі наступні твердження.

**Теорема 5.1.5:** (про інтегральне зображення). Якщо функція  $f(x)$  визначена, кусково – неперервна, абсолютно сумова й має обмежену варіацію на множині  $(0, \infty)$ , то справджується інтегральне зображення:

$$\frac{1}{2} [f(x-0) + f(x+0)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \int_0^{\infty} f(\xi) V(\xi, \beta) \sigma d\xi. \quad (5.47)$$

**Теорема 5.1.6** (про основу тотожність): Якщо функція  $f(x)$  має три неперервних похідних на множині  $(0, \infty)$ , тобто  $f(x) \in C^{(3)}(0, \infty)$ , зникає разом із своєю похідною першого порядку при  $x \rightarrow \infty$ , а в точці  $x=l_0$  задовольняє крайову умову:

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) f(x) \Big|_{x=l_0} = f_0 \equiv const, \quad (5.48)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення

диференціального оператора Фур'є  $\mathcal{L} = a^2 \frac{d^2}{dx^2}$ :

$$F + \left[ a^2 \frac{d^2 f}{dx^2} \right] = -\beta^2 \tilde{f}(\beta) + a^{-1} \beta f_0. \quad (5.49)$$

**Доведення:** Доведення тотожності (5.49) встановлюється безпосередньо методом подвійного інтегрування частинами під знаком інтегралу з використанням властивостей власних функцій  $V(x, \beta)$  та умови (5.49)

## 5.2. Скінченні гібридні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених неоднорідних $n$ -складових середовищ

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля про конструкцію на множині

$I_n = \left\{ z : z \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (l_{j-1}, l_j); l_0 \geq 0, l_{n+1} = l < \infty \right\}$  ненульового розв'язку системи

диференціальних рівнянь Фур'є другого порядку

$$L_j[V_j] \equiv \left( \frac{d^2}{dz^2} + \bar{b}_j \right) V_j = 0; \quad \bar{b}_j = \frac{1}{D_j} (\beta^2 + \gamma_j^2)^{1/2}, \quad j = \overline{1, n+1} \quad (5.50)$$

за крайовими умовами

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) V_1 \Big|_{z=l_0} = 0, \quad \left( \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) V_{n+1} \Big|_{z=l_{n+1}} = 0 \quad (5.51)$$

та системою  $n$ -інтерфейсних умов

$$\left[ \left( \tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) V_k - \left( \tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) V_{k+1} \right] \Big|_{z=l_k} = 0, \quad j = 1, 2, k = \overline{1, n}. \quad (5.52)$$

У рівностях (5.50) - (5.52) беруть участь величини:

$$a_j > 0, \gamma_j^2 \geq 0, \beta \in (0, \infty); |\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, |\alpha_{22}^{n+1}| + |\beta_{22}^{n+1}| \neq 0; \tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2);$$

$$\tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_k^m (\beta^2 + \gamma^2), m = 0, n+1; \gamma^2 = \max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_{n+1}^2 \}.$$

Запишемо числові матриці  $A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k \beta_{2j}^k \end{bmatrix}$ ,  $A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}$ ;  $j = 1, 2; k = \overline{1, n}$

та числа:

$$c_{j1,k} = -\det A_{j1,k} \equiv \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k,$$

$$c_{j2,k} = -\det A_{j2,k} \equiv \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k, \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n};$$

$$\begin{aligned} c_{11,12}^{12,k} &= \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k, c_{11,12}^{21,k} = \beta_{11}^k \delta_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{11}^k, \\ c_{21,22}^{12,k} &= \alpha_{12}^k \gamma_{22}^k - \alpha_{22}^k \gamma_{12}^k, c_{21,22}^{21,k} = \beta_{12}^k \delta_{22}^k - \beta_{22}^k \delta_{12}^k. \end{aligned} \quad (5.53)$$

Вимагатимемо при цьому також виконання співвідношень:

$$\begin{aligned} c_{11,k} c_{21,k} > 0; c_{j2,k} = 0; c_{11,12}^{12,k} = c_{11,12}^{21,k}; \\ c_{21,22}^{12,k} = c_{21,22}^{21,k}; j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (5.54)$$

Фундаментальну систему розв'язків для рівняння  $L_j[V] = 0$  утворюють функції  $\cos q_j z$  та  $\sin q_j z$ ,  $q_j \equiv \bar{v}_j$ , тому розв'язок крайової задачі (5.50) - (5.52) шукаємо у вигляді

$$V_j(z, \beta) = A_j(\beta) \cos q_j z + B_j(\beta) \sin q_j z, j = \overline{1, n+1}.$$

Крайові умови (5.51) та система  $n$  – інтерфейсних умов (5.52) для визначення довільних сталих  $A_j$  та  $B_j$  дають алгебраїчну систему з  $(2n+2)$  рівнянь

$$\left. \begin{aligned} \tilde{v}_{11}^{01}(q_1 l_0) A_1 + \tilde{v}_{11}^{02}(q_1 l_0) B_1 &= 0 \\ \tilde{v}_{j1}^{k1}(q_k l_k) A_k + \tilde{v}_{j1}^{k2}(q_k l_k) B_k - \tilde{v}_{j2}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - \tilde{v}_{j2}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} &= 0, \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n} \\ \tilde{v}_{22}^{n+1,1}(q_{n+1} l) A_{n+1} + \tilde{v}_{22}^{n+1,2}(q_{n+1} l) B_{n+1} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (5.55)$$

Для того, щоб алгебраїчна система (5.55) мала ненульовий розв'язок, необхідно і достатньо щоб її визначник був рівний нулю

$$\delta_n(\beta) \equiv -\omega_{n1}(\beta) \cdot \tilde{v}_{22}^{n+1,2}(q_{n+1} l) + \omega_{n2}(\beta) \cdot \tilde{v}_{22}^{n+1,1}(q_{n+1} l) = 0. \quad (5.56)$$

Тут

$$\tilde{v}_{ij}^{k1}(q_s l_m) \equiv \left( \tilde{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{ij}^k \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_m} = -\tilde{\alpha}_{ij}^k q_s \sin q_s l_m + \tilde{\beta}_{ij}^k \cos q_s l_m,$$

$$\tilde{v}_{ij}^{k2}(q_s l_m) \equiv \left( \tilde{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{ij}^k \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_m} = -\tilde{\alpha}_{ij}^k q_s \cos q_s l_m + \tilde{\beta}_{ij}^k \sin q_s l_m;$$

$$\psi_{jm}^k(z, y) = \tilde{v}_{11}^{kj}(z) \tilde{v}_{22}^{km}(y) - \tilde{v}_{21}^{kj}(z) \tilde{v}_{12}^{km}(y);$$

$$\omega_{01}(\beta) = -\tilde{v}_{11}^{01}(q_1 l_0), \omega_{02}(\beta) = -\tilde{v}_{11}^{02}(q_1 l_0);$$

$$\omega_{jm}(\beta) = \omega_{j-1,2}(\beta) \psi_{1m}^j(q_j l_j, q_{j+1} l_j) - \omega_{j-1,1}(\beta) \psi_{2m}^j(q_j l_j, q_{j+1} l_j).$$

**Теорема 5.2.1 (про дискретний спектр).** Корені  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \dots$  трансцендентного рівняння (5.56) утворюють дискретний спектр: корені дійсні, прості, (за винятком, можливо, нуля), симетрично розташовані

відносно нуля і утворюють в області  $\beta > 0$  монотонно зростаючу послідовність з єдиною граничною точкою  $\beta = +\infty$ .

**Доведення:** Доведення теореми проводиться з використанням методики праць [12]. Покажемо що спектр власних чисел складають дійсні числа. Припустивши, що власним числом крайової задачі (5.50) - (5.52) є комплексне число  $\beta = \sigma + is$ , якому відповідає власна-вектор функція  $V(z, \beta)$ . У той же час власним числом буде і спряжене до нього  $\beta = \sigma - is$ , якому відповідає власна-вектор функція  $\tilde{V}(z, \tilde{\beta})$ . Так як  $V(z, \beta)$  і  $\tilde{V}(z, \tilde{\beta})$  є власними вектор-функціями, що відповідають різним власним числам, то для виконується умова ортогональності (для різних  $\beta$  вони узагальнено ортогональними):

$$0 = \int_{l_0}^l V(z, \beta) \tilde{V}(z, \tilde{\beta}) \sigma(z) dz = \int_{l_0}^l [V]^2 \sigma(z) dz = \|V\|^2,$$

звідки випливає рівність  $V(z, \beta) = 0$ , що неможливо, а отже, власні числа не є комплексними, а є дійсними. Симетричність коренів тут очевидна.

Те що корені  $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \dots$  різні можна показати методом від супротивного. Оскільки  $\delta_n(\beta)$  є цілою аналітичною функцією від  $\beta$ , то трансцендентне рівняння (5.56) має зліченну множину коренів, які не мають скінченної граничної точки [12]. Це означає, що  $\lim_{m \rightarrow \infty} \beta_m = \infty$ . Теорема доведена.

Дискретному спектру власних чисел  $\beta_n$  відповідає дискретна власна вектор-функція  $V(z, \beta_m) = \{V_1(z, \beta_m), V_2(z, \beta_m), \dots, V_n(z, \beta_m), V_{n+1}(z, \beta_m)\}$ . Структура функцій  $V_k(z, \beta_m)$  одержується наступним способом. Підставимо в систему (5.55)  $\beta = \beta_m$  і відкинемо останнє рівняння внаслідок їх лінійної залежності. Покладемо  $A_1 = -A_0 \tilde{v}_{11}^{02}(q_{1m} l_0) \equiv A_0 \omega_{02}(\beta_m)$ ,  $B_1 = A_0 \tilde{v}_{11}^{01}(q_{1m} l_0) \equiv -A_0 \omega_{01}(\beta_m)$ . За першу компоненту власної вектор-функції, визначеної на інтервалі  $(l_0, l_1)$  візьмемо функцію

$$V_1(z, \beta_m) = A_0(\beta_m) [\omega_{02}(\beta_m) \cos q_{1m} z - \omega_{01}(\beta_m) \sin q_{1m} z], \quad q_{jn} = \frac{1}{\sqrt{D_j}} (\beta_m^2 + \gamma_j^2)^{1/2}, \quad \gamma_j^2 \geq 0, \quad j = \overline{1, n+1}.$$

Коефіцієнт  $A_0$  підлягає визначенню. Решта рівнянь розпадається на  $n$  сепаратних систем по два рівняння в кожній. Внаслідок рекурентних залежностей



$$A_{k+1} = \frac{1}{c_{21, k} q_{k+1, m}} \left[ A_k \psi_{12}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) + B_k \psi_{22}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) \right],$$

$$B_{k+1} = \frac{1}{c_{21, k} q_{k+1, m}} \left[ A_k \psi_{11}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) + B_k \psi_{21}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) \right], \quad k = \overline{1, n}$$

одержуємо, що

$$A_k = \frac{A_0}{\prod_{i=1}^k c_{21, i} q_{i+1, m}} \omega_{k2}(\beta_m); \quad B_{k+1} = \frac{A_0}{\prod_{i=1}^k c_{21, i} q_{i+1, m}} \omega_{k1}(\beta_m). \quad (5.57)$$

Якщо покласти  $A_0 = \prod_{i=1}^n c_{21, i} q_{i+1, m}$ ;  $G_k(z, \beta_m) = \omega_{k-1, 2}(\beta_m) \cos q_{km} z - \omega_{k-1, 1}(\beta_m) \sin q_{km} z$ ,

то компоненти  $V_k$  спектральної вектор-функції  $V(z, \beta_m)$  будуть визначені:

$$V_k(z, \beta_m) = \left( \prod_{i=k}^n c_{21, i} q_{i+1, m} \right) G_k(z, \beta_m), \quad k = \overline{1, n}; \quad (5.58)$$

$$V_{n+1}(z, \beta_m) = \omega_{n2}(\beta_m) \cos q_{n+1, m} z - \omega_{n1}(\beta_m) \sin q_{n+1, m} z.$$

Якщо  $\theta(x)$ - одинична функція Гевісайда, то спектральна вектор-функція запишеться у вигляді

$$V(z, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} V_k(z, \beta_j) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z). \quad (5.59)$$

**Теорема 5.2.2** (про дискретну функцію). Система власних функцій  $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  диференціального оператора Фур'є  $F_n$ , визначеного рівністю (1.3.0), узагальнено ортогональна, повна й замкнута на множині  $I_n$ .

**Доведення:** Покажемо, що система власних вектор-функцій  $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  узагальнено ортогональна на множині  $I_n$  з ваговою функцією

$$\sigma(z) = \sum_{k=1}^{n+1} \sigma_k \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z),$$

$$\sigma_k = \frac{1}{D_k} \prod_{m=k}^n \frac{c_{11, m}}{c_{21, m}}, \quad k = \overline{1, n}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}.$$

Дійсно, розглянемо дві власні вектор функції  $V(z, \beta_j)$   $V(z, \beta_m)$ , які відповідають власним значенням  $\beta_j \neq \beta_m$ . З тотожностей

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} + q_{sj}^2 \right) V_s(z, \beta_j) \equiv 0, \quad \left( \frac{d^2}{dz^2} + q_{sm}^2 \right) V_s(z, \beta_m) \equiv 0, \quad s = \overline{1, n+1}$$

одержуємо співвідношення

$$V_s(z, \beta_m)V_s(z, \beta_j) = \frac{a_s^2}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \frac{d}{dz} \left[ V_s(z, \beta_m) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_j) - V_s(z, \beta_j) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_m) \right]. \quad (5.60)$$

Помножимо рівність (5.60) на  $\sigma_z dz$ , про інтегруємо від  $l_{s-1}$  до  $l_s$  і просумуємо по  $s$  від 1 до  $n+1$ . В результаті одержимо рівність

$$\begin{aligned} \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_j)V(z, \beta_m)\sigma(z)dz &= \sum_{s=1}^{n+1} \frac{\sigma_s a_s^2}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \left[ V_s(z, \beta_m) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_j) - V_s(z, \beta_j) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_m) \right] \Big|_{l_{s-1}}^{l_s} = \\ &= \frac{1}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \left\{ \sigma_1 a_1^2 \left[ V_1(l_0, \beta_m) \frac{d}{dz} V_1(l_0, \beta_j) - V_1(l_0, \beta_j) \frac{d}{dz} V_1(l_0, \beta_m) \right] + \left[ V_{n+1}(l, \beta_m) \frac{d}{dz} V_{n+1}(l, \beta_j) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - V_{n+1}(l, \beta_j) \frac{d}{dz} V_{n+1}(l, \beta_m) \right] + \sum_{k=1}^n \left[ a_k^2 \sigma_k (V_k(z, \beta_m)V_{k'}(z, \beta_j) - V_k(z, \beta_j)V_{k'}(z, \beta_m)) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a_{k+1}^2 \sigma_k (V_{k+1}(z, \beta_m)V_{k'+1}(z, \beta_j) - V_{k+1}(z, \beta_j)V_{k'+1}(z, \beta_m)) \right] \Big|_{z=l_k} \right\}. \end{aligned} \quad (5.61)$$

Розглянемо матриці  $\tilde{A}_{11,k} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{11}^k & \tilde{\beta}_{11}^k \\ \tilde{\alpha}_{21}^k & \tilde{\beta}_{21}^k \end{bmatrix}$ ,  $\tilde{A}_{12,k} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{12}^k & \tilde{\beta}_{12}^k \\ \tilde{\alpha}_{22}^k & \tilde{\beta}_{22}^k \end{bmatrix}$  і визначимо числа

$$\begin{aligned} \tilde{c}_{11,12}^{11,k} &= \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad \tilde{c}_{11,12}^{12,k} = \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\beta}_{12}^k, \\ \tilde{c}_{11,12}^{21,k} &= \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad \tilde{c}_{11,12}^{22,k} = \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\beta}_{12}^k. \end{aligned}$$

Оскільки  $\tilde{\alpha}_{11}^k(\beta)\tilde{\beta}_{21}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta)\tilde{\beta}_{11}^k(\beta) = -\tilde{c}_{11,k} + (\tilde{c}_{11,12}^{12,k} - \tilde{c}_{11,12}^{21,k})\beta^2 - \tilde{c}_{12,k}\beta^4 = -\tilde{c}_{11,k} \neq 0$ ,

то алгебраїчна система

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{11}^k V_{k'}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{11}^k V_k(l_k, \beta) &= \tilde{\alpha}_{12}^k V_{k'+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta), \\ \tilde{\alpha}_{21}^k V_{k'}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{21}^k V_k(l_k, \beta) &= \tilde{\alpha}_{22}^k V_{k'+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta), \end{aligned} \quad (5.62)$$

відносно  $V_k(l_k, \beta)$  та  $V_{k'}(l_k, \beta)$  має єдиний розв'язок

$$\begin{aligned} V_k(l_k, \beta) &= -\frac{1}{c_{11,k}} \left[ \tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta) V_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta) V_{k'+1}(l_k, \beta) \right], \\ V_{k'}(l_k, \beta) &= \frac{1}{c_{11,k}} \left[ \tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta) V_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta) V_{k'+1}(l_k, \beta) \right]. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Поклавши для простоти  $\beta_m \equiv \beta, \beta_j \equiv \lambda$ , розглянемо вираз

$$\begin{aligned} V_k(l_k, \beta)V_k'(l_k, \lambda) - V_k(l_k, \lambda)V_k'(l_k, \beta) &= \frac{1}{c_{11,k}^2} \{ A_{11}(\lambda, \beta)V_{k+1}'(l_k, \lambda)V_{k+1}'(l_k, \beta) + \\ &+ A_{12}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \beta)V_{k+1}'(l_k, \lambda) + A_{21}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \lambda)V_{k+1}'(l_k, \beta) + A_{22}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \lambda)V_{k+1}'(l_k, \beta) \} \end{aligned}$$

$$A_{ij}(\lambda, \beta) = \tilde{c}_{11,12}^{1i,k}(\lambda) \tilde{c}_{11,12}^{2j,k}(\beta) - \tilde{c}_{11,12}^{2i,k}(\lambda) \tilde{c}_{11,12}^{1j,k}(\beta); i, j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (5.64)$$

Безпосередніми обчисленнями встановлюємо рівності:

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{11}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{11}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\beta) \tilde{\beta}_{11}^k(\lambda) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \alpha_{11}^k, \quad \alpha_{11}^k = \alpha_{11}^k \gamma_{11}^k - \delta_{11}^k \beta_{11}^k \geq 0; \\ \tilde{\alpha}_{21}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta) \tilde{\beta}_{21}^k(\lambda) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \alpha_{22}^k, \quad \alpha_{22}^k = \alpha_{21}^k \gamma_{21}^k - \delta_{21}^k \beta_{21}^k \geq 0; \\ \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta) \tilde{\beta}_{11}^k(\lambda) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta) &= c_{11,k} - (\beta^2 - \lambda^2) \alpha_{12,1}^k; \\ \alpha_{12,1}^k &= \delta_{11}^k \beta_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k \equiv \alpha_{12,2}^k = \delta_{11}^k \beta_{21}^k - \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k. \end{aligned} \quad (5.65)$$

Внаслідок рівностей (5.65) маємо:

$$\begin{aligned} A_{22}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[ \alpha_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k(\beta) \tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k \tilde{\beta}_{12}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \alpha_{12}^k (\tilde{\beta}_{12}^k(\beta) \tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \tilde{\beta}_{12}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{22}^k(\beta)) - c_{11,k} c_{21,22}^{22,k} \right]; \\ A_{11}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[ \alpha_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k(\beta) \tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda) \tilde{\alpha}_{12}^k(\beta) + \alpha_{12}^k (\tilde{\alpha}_{12}^k(\beta) \tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda) + \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda) \tilde{\alpha}_{22}^k(\beta)) - c_{11,k} c_{21,22}^{11,k} \right]; \\ A_{12}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[ \alpha_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k(\beta) \tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \right. \\ &\quad \left. + \alpha_{12}^k (\tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda) \tilde{\beta}_{22}^k(\beta)) - c_{11,k} c_{21,22}^{12,k} \right] c_{11,k} c_{21,k}. \end{aligned}$$

Визначимо функції  $z_{jk}(\beta) = \tilde{\alpha}_{j2}^k(\beta) V'_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{j2}^k(\beta) V'_{k+1}(l_k, \beta)$ ,  $j = 1, 2$ . В

результаті підстановки рівностей (5.66) в (5.64) одержуємо:

$$\begin{aligned} V_k(l_k, \beta) V'_k(l_k, \lambda) - V_k(l_k, \lambda) V'_k(l_k, \beta) &= -c_{11,k}^{-1} (\beta^2 - \lambda^2) \left\{ a_{11}^k z_{2k}(\lambda) z_{2k}(\beta) + a_{22}^k z_{1k}(\lambda) z_{1k}(\beta) + \right. \\ &\quad \left. + a_{12}^k (z_{1k}(\beta) z_{2k}(\lambda) + z_{1k}(\lambda) z_{2k}(\beta)) - c_{11,k} (c_{21,22}^{11,k} V'_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) + c_{21,22}^{11,k} V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)) + \right. \\ &\quad \left. + c_{21,22}^{12,k} (V_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) + V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)) \right\} + c_{11,k} c_{21,k} \times \\ &\quad \times [V_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) - V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)]. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Оскільки  $(a_{12}^k)^2 - a_{11}^k a_{22}^k \equiv a_{12,1}^k a_{12,2}^k - a_{11}^k a_{22}^k = -c_{11,k} c_{12,k}^k = -c_{11,k} \cdot 0 = 0$ ,

$(c_{21,22}^{12,k})^2 - c_{21,22}^{11,k} c_{21,22}^{22,k} \equiv c_{21,22}^{12,k} c_{21,22}^{21,k} - c_{21,22}^{11,k} c_{21,22}^{22,k} = -c_{21,k} c_{22,k} = 0$ , то сума (5.61) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} - \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-2} a_k^2 \sigma_k \left\{ \left[ \sqrt{a_{11}^k} z_{2k}(\lambda) + \sqrt{a_{22}^k} z_{1k}(\lambda) \right] \left[ \sqrt{a_{11}^k} z_{2k}(\beta) + \sqrt{a_{22}^k} z_{1k}(\beta) \right] + c_{11,k} \left[ \sqrt{-c_{21,22}^{11,k}} V'_{k+1}(l_k, \lambda) + \right. \right. \\ \left. \left. + \sqrt{-c_{21,22}^{22,k}} V_{k+1}(l_k, \lambda) \right] \left[ \sqrt{-c_{21,22}^{11,k}} V'_{k+1}(l_k, \beta) + \sqrt{-c_{21,22}^{22,k}} V_{k+1}(l_k, \beta) \right] \right\} (\beta^2 - \lambda^2) \equiv -(\beta^2 - \lambda^2) G_n(\beta, \lambda). \end{aligned} \quad (5.68)$$

Вважаємо, що  $c_{21,22}^{11,k} = \alpha_{12}^k \delta_{22}^k - \alpha_{22}^k \delta_{12}^k \leq 0$ ,  $c_{21,22}^{22,k} = \beta_{12}^k \gamma_{22}^k - \beta_{22}^k \gamma_{12}^k \leq 0$ . В точці  $z = l_0$

при  $\gamma^2 = 0$  (для простоти) маємо тотожні рівності:

$$\begin{aligned} \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_n) + \beta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_n) - \beta_n^2 \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_n) \right] &= 0, \\ \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) - \beta_j^2 \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] &= 0. \end{aligned} \quad (5.69)$$

З одного боку

$$\begin{aligned} & \left[ \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \\ & - \left[ \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \times \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] = \\ & = (\alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \delta_{11}^0 \beta_{11}^0) \left[ V_1(l_0, \beta_j) V_1'(l_0, \beta_m) - V_1(l_0, \beta_m) V_1'(l_0, \beta_j) \right] \end{aligned} \quad (5.70)$$

З другого боку, внаслідок рівностей (5.69) маємо

$$\begin{aligned} & \left[ \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \\ & - \left[ \alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \times \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] = \\ & = \beta_m^2 \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \times \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \\ & - \beta_j^2 \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] = \\ & = (\beta_m^2 - \beta_j^2) \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \end{aligned} \quad (5.71)$$

Із рівностей (5.70) та (5.71) знаходимо, що

$$\begin{aligned} & V_1(l_0, \beta_m) V_1'(l_0, \beta_m) - V_1(l_0, \beta_j) V_1'(l_0, \beta_m) = \\ & = \frac{(\beta_m^2 - \beta_j^2)}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right]. \end{aligned} \quad (5.72)$$

Аналогічно знаходимо, що

$$\begin{aligned} & V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) - V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) = \\ & = \frac{(\beta_m^2 - \beta_j^2)}{\delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1} - \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1}} \left[ \delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \cdot \left[ \delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right]. \end{aligned} \quad (5.73)$$

Підстановка рівностей (5.68), (5.72) та (5.73) в (5.61) приводить до співвідношення:

$$\begin{aligned} & \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \sigma(z) dz = - \frac{\sigma_1 \alpha_1^2}{-\alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 + \delta_{11}^0 \beta_{11}^0} \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \times \\ & \times \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \frac{\sigma_{n+1} \alpha_{n+1}^2}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1}} \left[ \delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \times \\ & \times \left[ \delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] - G_n(\beta_m, \beta_j) \equiv -G_n^{(1)}(\beta_m, \beta_j) \end{aligned} \quad (5.74)$$

Якщо визначити узагальнений скалярний добуток [19]

$$\left( V(z, \beta_m), V(z, \beta_j) \right)_1 = \left( V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \right) + G_n^{(1)}(\beta_m, \beta_j), \quad (5.75)$$

де класичний скалярний добуток  $\left( V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \right) = \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \sigma(z) dz$ , то з рівності (5.74) випливає, що для всіх  $\beta_m \neq \beta_j$   $\left( V(z, \beta_m), V(z, \beta_j) \right)_1 = 0$ .

Остання рівність означає, що система власних функцій узагальнено ортогональна.

Рівність (5.75) породжує квадрат норми власної функції  $V(z, \beta_j)$ :

$$\|V(z, \beta_j)\|_1^2 = \|V(z, \beta_j)\|^2 + G_n^{(1)}(\beta_j, \beta_j). \quad (5.76)$$

Стандартним способом [12] можна показати, що узагальнено ортогональна на множині  $I_n$  система вектор функцій  $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$  є повною і замкненою.

Справедливі наступні твердження.

**Теорема 5.2.3** (типу теореми Стеклова): *Будь-яка тричі неперервно диференційована на множині  $I_n$  вектор-функція  $f(z)$ , яка задовольняє крайові умови (1.51) та систему інтерфейсних умов (1.52) зображається на кожній компактній множині  $I_n^* \subset I_n$  абсолютно і рівномірно збіжним рядом Фур'є за системою власних вектор-функцій  $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ :*

$$f(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_{I_0}^l f(\xi) V(\xi, \beta_j) \sigma(\xi) d\xi \frac{V(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|_1^2} \quad (5.77)$$

**Доведення:** Доведення теореми ґрунтується на використанні підходу роботи [19]. З врахуванням того, що вектор-функція  $f \in C^2(I_n)$ , задовольняє крайові та інтерфейсні умови крайової задачі та при допомозі функцій впливу задачі, враховуючи, що  $L_k[f_k(z)] = g_k(z) \sqrt{\sigma_k}$ ,  $k = \overline{1, n+1}$ , де  $g(z)$ - визначена з допомогою  $f$  та оператора  $L$  неперервна вектор-функція в  $I_n$ , отримаємо:

$$f_m(z) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} H_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_k} g_k(\xi) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_k}^{I_{k+1}} K_{mk}(z, \xi) g_k(\xi) d\xi \quad (5.78)$$

де ядра  $K_{mk}(z, \xi) = H_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_m \sigma_k}$  ( $m \leq k$ ) є також узагальнено-симетричними відносно діагоналі  $z = \xi$ :  $K_{mk}(z, \xi) = -\prod_{s=i}^{k-1} \frac{c_{1s}}{c_{2s}} K_{km}(\xi, z)$ .

Запишемо крайову задачу Штурма-Ліувілля (5.50) - (5.52) в інтегральній формі відносно функцій  $\varphi_m(z, \beta) \equiv \sqrt{\sigma_m} \frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|}$  через функції впливу:

$$\frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} = \beta^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^k H_{mk}(z, \xi) \sigma_k \frac{V_m(\xi, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} d\xi.$$

Ця постановка означає, що власні числа та власні вектор-функції для задачі (5.50) - (5.52) є відповідно характеристичними числами та характеристичними вектор-функціями системи інтегральних рівнянь:

$$\frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} = \beta^2 \sum_{i=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^k K_{mk}(z, \xi) \sqrt{\frac{\sigma_k}{\sigma_m}} \frac{V_k(\xi, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} d\xi ; n = \overline{1, n}. \quad (5.79)$$

Так як  $V_m(z, \beta_j)$  є узагальнено ортонормованими з вагою  $\sigma_m$  вектор-функції крайової задачі, то маємо  $\sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_k}^{I_{k+1}} \frac{V_k(z, \beta_j) V_k(z, \beta_i)}{\|V(z, \beta_i)\|^2} \sigma(z) dz = \delta_{ji}$ .

Ядра  $K_{ik}(z, \xi)$  системи інтегральних рівнянь (5.79) є неперервні при  $\{z, \xi\} \subset I_n$ , рівномірно обмежені по  $z$ , а тому є інтегровані з квадратом по змінній  $\xi$ :  $\sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} K_{mk}^2(z, \xi) d\xi < \mu = const < \infty$  і їх як функції змінної  $\xi$  можна формально розвинути в ряд Фур'є за системою власних функцій:

$$K_{mk}(z, \xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} a_m(z, \beta_j) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|};$$

де за означенням:  $a_m(z, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} K_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} d\xi = \sqrt{\sigma_k} \frac{V_m(\xi, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|}$ , (згідно

(5.79)). Отже,

$$K_{mk}(z, \xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \frac{V_m(z, \beta_j) V_k(\xi, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|^2} \sqrt{\sigma_m \sigma_k}, \quad m, j = \overline{1, n+1}. \quad (5.80)$$

Згідно з нерівністю Бесселя, що має місце для ряду правої частини (5.80) справедлива оцінка :

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left[ \frac{V_m(z, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|^2} \sigma_m \right]^2 \leq \sum_{k=1}^{\infty} \int_{I_{k-1}}^{I_k} K_{mk}^2(z, \xi) d\xi < \infty. \quad (5.81)$$

Вектор-функцію  $g$  з (5.77), неперервну на  $I_n$  розвинемо в ряд Фур'є за системою ортонормованих вектор-функцій  $\frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|}$ :

$$g_m(\xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} b(\beta_j) \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \sqrt{\sigma_m}; \quad (5.82)$$

Тут  $b(\beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k(\xi) \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi$ ;  $\sum_{j=1}^{\infty} b(\beta_j)^2 \leq \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k^2(\xi) d\xi < \infty$  (згідно

нерівності Бесселя), тобто ряд з членом  $b(\beta_j)^2$  збігається.

Розвинемо за системою вектор-функцій  $\frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|}$  формально в ряд Фур'є

так же ліву частину частину рівності (5.78):

$$f_m(z) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \gamma(\beta_j) \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \quad (5.83)$$

де за означенням:

$$\begin{aligned} \gamma(\beta_j) &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \sqrt{\sigma_k} f_k(z) \frac{V_k(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} dz = \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k(\xi) d\xi \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} K_{k,k_1}(z, \xi) \sqrt{\sigma_{k_1}} \frac{V_{k_1}(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} dz = \\ &= \frac{1}{\beta_j^2} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k(\xi) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} d\xi = \sqrt{\sigma_k} \frac{b(\beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|}. \end{aligned} \quad (5.84)$$

З урахуванням (5.84) розклад (5.83) набуде вигляду:

$$f_m(z) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b(\beta_j) V_m(z, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|} \sqrt{\sigma_m}, \quad m = \overline{1, n+1}. \quad (5.85)$$

Покажемо, що ряд (5.85) є збіжний абсолютно і рівномірно і має свою сумою  $f_m(z)$ . Використовуючи критерій Коші рівномірної збіжності функціональних рядів [12], нерівність Коші-Буняковського, нерівність (5.81) та оцінку збіжності ряду (5.82), отримаємо для оцінки за модулем відрізку ряду:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{b_{j_1} V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_m} \right| &\leq \sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{|b(\beta_{j_1})| |V_m(z, \beta_{j_1})|}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} |\sqrt{\sigma_m}| \leq \\ &\leq \left( \sum_{j_1=j+1}^{j+L} b(\beta_{j_1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left( \sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{[V_m(z, \beta_{j_1})]^2}{(\beta_{j_1}^2)^2} \right)^{\frac{1}{2}} |\sqrt{\sigma_m}| \leq \sqrt{M} \left( \sum_{j_1=j+1}^{\infty} b(\beta_{j_1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (5.86)$$

Так як оцінки, а відтак і граничне співвідношення (5.86) абсолютні і рівномірні, то згідно із критерієм Коші ряд (5.85) збігається регулярно і його сума є неперервною функцією.

Покажемо, що сума цього ряду є  $f_m(z)$ , оцінивши в середньому різницю:

$$\begin{aligned}
f_m(z) - \sum_{j_1=1}^j \frac{b(\beta_{j_1})V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}(z, \xi) g_k(\xi) d\xi - \\
&- \sum_{j_1=1}^{\infty} \frac{V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \left[ \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k(\xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi \right] = \\
&= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left( K_{mk}(z, \xi) - \sum_{j_1=1}^j \frac{V_m(\xi, \beta_{j_1})V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|^2} \sqrt{\sigma_m \sigma_k} g_k(\xi) \right) d\xi = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}^j(z, \xi) g_k(\xi) d\xi.
\end{aligned} \tag{5.87}$$

Покажемо, що будь-яке характеристичне число  $\beta_{j+i}^2 (i > 0)$  і відповідна йому характеристична вектор-функція  $V(z, \beta_{j+i})$  ядра  $K(z, \xi)$  є відповідно характеристичною вектор-функцією і для ядра  $K^j(z, \xi)$ , яке також є симетричним. Розглянемо рівняння:

$$\begin{aligned}
\alpha_m(z, \beta_{j+i}) &= \frac{V_m(z, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i}) + i\|} \sqrt{\sigma_m} - \beta_{j+i}^2 \sum_{k=1}^m \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}^j(z, \xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi = \\
&= \varphi_m(z, \beta_{j+i}) - \beta_{j+i}^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}^j(x, \xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi + \\
&+ \beta_{j+i}^2 \sum_{j_1=1}^j \frac{V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_m} \left( \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i})V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|^2} \sigma_k d\xi \right).
\end{aligned}$$

За тотожністю (5.78) і ортогональністю вектор-функцій  $V(z, \beta_{j_1}), V(z, \beta_{j+i}); j_1 = \overline{1, j}; j, i > 0$ , отримуємо тотожність  $\alpha_m(z, \beta_{j+i}) = 0$ , що потрібно було показати.

Справедливе і зворотне твердження, що будь-яке характеристичне число  $\mu_j^2$  ядра  $K^j(z, \xi)$  буде одним із характеристичних чисел  $\beta_{j+i}^2$  ядра  $K(z, \xi)$ , а відповідна цьому числу нетривіальна вектор-функція  $\psi$  буде характеристичною функцією обох ядер. Для цього досить розглянути тотожність (враховуючи симетрію ядра  $K^j(z, \xi)$ ):  $\psi_m(z) = \mu^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}^{j_1}(z, \xi) \psi_k(\xi, \mu) d\xi$ ,  $\mu^2 = \beta_j^2$ ,  $j_1 = \overline{1, j}$ , що приводить до тотожності  $\psi_m(z) = \mu^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}(z, \xi) \psi_{kj}(\xi, \mu) d\xi$ .



Далі, використовуючи відому квадратичну оцінку [12]  $\|\Omega\| \leq \frac{1}{\tau} \|\Theta\|$ , для інтегрального оператора  $\Omega$  з симетричним ядром, де  $\tau$  - мінімальне характеристичне число ядра, з (1.87) дістанемо оцінку:

$$\begin{aligned} \left\| f_m(z) - \sum_{j=1}^j \frac{b(\beta_{j_1}) V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \right\| &= \left( \sum_{k=1}^{n+1} \left( \int_{l_{k-1}}^{l_k} f_m(z) - \sum_{j=1}^j \frac{b(\beta_{j_1}) V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} dz \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} = \\ &= \left( \sum_{k=1}^{n+1} \left( \int_{l_{k-1}}^{l_k} K_{mk}^j(z, \xi) g_k(\xi) d\xi \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{\beta_{j+1}^2} \left( \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k^2(\xi) d\xi \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\beta_{j+1}^2} \|g(\xi)\|, \end{aligned}$$

де  $\beta_{j+1}^2$  є мінімальним характеристичним числом ядра  $K^j(z, \xi)$ . Згідно теореми по дискретний спектр  $\beta_{j+1}^2 \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \infty$ , а отже ряд (5.85) збігається в середньому до функції  $f_m(z)$ . Так як цей ряд збігається рівномірно до своєї суми, що є неперервною функцією, то цією сумою є функція  $f_m(z)$ :

$$f_m(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b(\beta_j) V_m(z, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|} = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|},$$

де  $a_j = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} f_k(z) \sigma_k V_k(z, \beta_j) dz$ .

Отже, встановлюємо рівність

$$f_m(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} f_k(\xi) V_k(\xi, \beta_j) \sigma_k d\xi \frac{V_k(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|_1}, \quad (5.88)$$

що підтверджує регулярну збіжність ряду до  $f_m(z)$ . Теорема доведена.

Ряд Фур'є (5.77) породжує пряме  $F_n$  та обернене  $F_n^{-1}$  скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного  $n+1$  - складового середовища у випадку, коли спектральний параметр входить в крайові умови і в систему інтерфейсних умов:

$$F_n[f(z)] = \int_{l_0}^l f(z) V(z, \beta_n) \sigma(z) dz \equiv f_n, \quad (5.89)$$

$$F_n^{-1}[f_n] = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \frac{V(z, \beta_n)}{\|V(z, \beta_n)\|_1} \equiv f(z). \quad (5.90)$$

З метою застосування побудованих інтегральних перетворень для знаходження аналітичних розв'язків розглядуваних математичних моделей з урахуванням нестационарності режимів на поверхнях  $z = l_j, j = 0, n$  одержимо основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Фур'є

$$L_n = \sum_{i=1}^{n+1} D_i \theta(z - l_{i-1}) \theta(l_i - z) d^2 / dz^2 .$$

**Теорема 5.2.4** (про основну тотожність): Якщо вектор-функція  $f(z) \in C^{(3)}(I_n)$ , задовольняє систему інтерфейсних умов (5.52) і крайові умови

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) f_1(z) \Big|_{z=l_0} = f_{10}, \left( \tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) f_{n+1}(z) \Big|_{z=l} = f_{n+1,l}, \quad (5.91)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $\zeta_n$ :

$$F_n [\zeta_n [f(z)]] = -\beta_n^2 f_n - \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i(z) V_i(z, \beta_n) \sigma_i dz + \\ + (\tilde{\alpha}_{22}^{n+1})^{-1} V_{n+1}(l, \beta_n) f_{n+1,l} - D_1 \sigma_1 (\tilde{\alpha}_{11}^0)^{-1} \cdot V_1(l, \beta_n) f_{10} \quad (5.92)$$

**Доведення:** Виходячи із системи інтерфейсних умов встановлюємо базову тотожність

$$\left[ f_k(z) V'_k(z, \beta_n) - f'_k(z) V_k(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_k} = \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[ f_{k+1}(z) V'_{k+1}(z, \beta_n) - f'_{k+1}(z) V_{k+1}(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_k} = \overline{1}, n \quad (5.93)$$

Якщо в лівій частині (5.91) проінтегрувати два рази частинами, то позаінтегральні члени в точках  $z=l_k$  внаслідок вибору  $\sigma_k$  та базової тотожності (5.93) перетворяться в нуль. Доданки в точках  $z=l_0$  та  $z=l \equiv l_{n+1}$  перетворюються стандартним способом. Наслідком усього цього є рівність:

$$F_n [\zeta_n [f(z)]] \equiv \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} D_i \frac{d^2 f_i}{dz^2} V_i(z, \beta_n) \sigma_i dz = \\ = \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \sigma_i D_i \left( \frac{df_i}{dz} V_i(z, \beta_n) - f_i(z) \frac{d}{dz} V_i(z, \beta_n) \right) \Big|_{z=l_{i-1}}^{z=l_i} + \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i(z) \left( D_i \frac{d^2 f_i}{dz^2} V_i \right) \sigma_i dz = \quad (5.94) \\ = -\sigma_1 D_1 \left[ f'_1(z) V_1(z, \beta_n) - f_1(z) V'_1(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_0} + \left[ f'_{n+1}(z) V_{n+1}(z, \beta_n) - f_{n+1}(z) V'_{n+1}(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l} + \\ + \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i(z) \left[ -D_i \frac{\beta_n^2 + \gamma_i^2}{D_i} V_i \right] \sigma_i dz$$

Розклавши суму на два доданки та перетворивши позаінтегральні члени стандартним способом, одержуємо тотожність (5.92).

Якщо система інтерфейсних умов є неоднорідною, тобто

$$\left[ \left( \tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(z) - \left( \tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1}(z) \right]_{z=l_k} = \psi_{jk} \quad (5.95)$$

то базова тотожність (5.93) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \left[ g'_k(z) V_k(z, \beta_j) - g_k(z) V'_k(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} &= \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[ g'_{k+1}(z) V_{k+1}(z, \beta_j) - g_{k+1}(z) V'_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} + \\ &+ \frac{1}{c_{11,k}} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{2k} - \left[ \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{1k} \end{aligned} \quad (5.96)$$

Внаслідок рівностей:

$$\begin{aligned} (\tilde{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_1(l_0, \beta_j) &= (\alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \delta_{11}^0 \beta_{11}^0)^{-1} \left[ \delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right], \\ (\tilde{\alpha}_{22}^{n+1})^{-1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) &= (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1})^{-1} \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] \end{aligned}$$

та базової тотожності (5.93) основна тотожність (5.92) має структуру:

$$\begin{aligned} F_n \left[ L_n \left[ g(z) \right] \right] &= -\beta_n^2 g_n - \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \int_{l_{i-1}}^{l_i} g_i(z) V_i(z, \beta_j) \sigma_i dz + \\ &+ \frac{\alpha_1^2 \sigma_1}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left( \delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right) g_{10} + \\ &+ \frac{D_{n+1} \sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1}} \times \left[ \delta_{22}^{n+1} V'_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] g_{n+1,l} + \\ &+ \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k^2 \sigma_k}{c_{11,k}} \times \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{2k} - \left[ \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{1k} \end{aligned} \quad (5.97)$$

Логічну схему застосування запроваджених скінченних інтегральних перетворень Фур'є  $F_n$  та  $F_n^{-1}$  продемонструємо на окремих математичних моделях для неоднорідних середовищах поширення сигналів.

**Квазістатична гібридна модель:** Побудувати обмежений в області  $D_n = \{(t, z) : t \geq 0; z \in I_n\}$  розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу в обмеженому  $(n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів на поверхнях  $z = l_j, j = \overline{0, n+1}$

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \chi_m^2 u_m - D_m \frac{\partial^2 u_m}{\partial z^2} = f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (5.98)$$

за початковими умовами

$$u_m(t, z)|_{t=0} = g_m(z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (5.99)$$

крайовими умовами

$$\begin{aligned} \left[ \left( \alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1(t, z) \Big|_{z=l_0} &= \omega_0(t) \\ \left[ \left( \alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{n+1}(t, z) \Big|_{z=l} &= \omega_l(t) \end{aligned} \quad (5.100)$$

та системою  $n$  - інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[ \left( \alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1}(t, z) - \left[ \left( \alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_k(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{jk}(t); \quad (5.101)$$

$$j=1, 2; k = \overline{1, n}$$

Запишемо (5.98) і початкові умови (5.99) у матричній формі:

$$\begin{aligned} \left[ \begin{array}{c} \left( \frac{\partial}{\partial t} + \chi_1^2 - D_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_1 \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \chi_2^2 - D_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2 \\ \dots \\ \left( \frac{\partial}{\partial t} + \chi_{n+1}^2 - D_{n+1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1} \end{array} \right] &= \left[ \begin{array}{c} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{array} \right] \\ \left[ \begin{array}{c} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{array} \right] \Big|_{t=0} &= \left[ \begin{array}{c} g_1(t, z) \\ g_2(t, z) \\ \dots \\ g_{n+1}(t, z) \end{array} \right] \end{aligned} \quad (5.102)$$

Інтегральний оператор  $F_n$  зобразимо у вигляді операторної матриці-рядка:

$$F_n[\dots] = \left[ \int_{l_0}^{l_1} \dots V_1(z, \beta_m) \sigma_1 dz \int_{l_1}^{l_2} \dots V_2(z, \beta_m) \sigma_2 dz \dots \int_{l_{n-1}}^{l_n} \dots V_n(z, \beta_m) \sigma_n dz \int_{l_n}^{l_{n+1}} \dots V_{n+1}(z, \beta_m) \sigma_{n+1} dz \right]. \quad (5.103)$$

В припущенні, що  $\max\{z_1^2; z_2^2; \dots; z_n^2; z_{n+1}^2\} = z_{n+1}^2$ , покладемо

$$\gamma_i^2 = \chi_{n+1}^2 - \chi_i^2 \geq 0, i = \overline{1, n}.$$

Застосуємо за правилом множення матриць операторну матрицю-рядок (5.103) до задачі (5.102). Внаслідок тотожності (5.97) одержуємо задачу Коші:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d}{dt} + (\beta_m^2 + z_{n+1}^2) \right] u_m(t) &= F_m(t); \\ u_m(t) \Big|_{t=0} &= g_m \end{aligned} \quad (5.104)$$

Тут:

$$\begin{aligned} u_m(t) &= \sum_{j=1}^{n+1} u_{jm}(t); u_{jm}(t) = \int_{l_{j-1}}^{l_j} u_j(t, z) V_j(z, \beta_m) \sigma_j dz; \\ F_m(t) &= f_m(t) + \frac{\alpha_1^2 \sigma_1}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left[ \delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \omega_0(t) + \\ &+ \left( \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left[ \delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \omega_l(t) + \\ &+ \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k^2 \sigma_k}{c_{11,k}} \left[ \left( \tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_m) \Big|_{z=l_k} \bar{\omega}_{2k} - \left( \tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_m) \Big|_{z=l_k} \bar{\omega}_{1k}(t) \right], \end{aligned}$$

$$f_m(t) = \sum_{j=1}^{n+1} f_{jm}(t), \quad g_m = \sum_{j=1}^{n+1} g_{jm}(z),$$

Розв'язком задачі Коші (5.104) є функція

$$u_m(t) = e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} g_m + \int_0^t e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)(t-\tau)} F_m(\tau) d\tau \quad (5.105)$$

Інтегральний оператор  $F_n^{-1}$  як обернений до  $F_n$  зобразимо у вигляді операторної матриці-стовпця:

$$F_n^{-1}[\dots] = \begin{bmatrix} \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_1(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|_1^2 \right)^{-1} \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_2(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|_1^2 \right)^{-1} \\ \dots \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_{n+1}(z, \beta_m) \left( \|V(z, \beta_m)\|_1^2 \right)^{-1} \end{bmatrix} \quad (5.106)$$

Якщо тепер застосувати за правилом множення матриць операторну матрицю-стовпець (5.106) до матриці-елемента  $[u_m(t)]$ , де функція  $u_m(t)$  визначена формулою (5.105), то після елементарних перетворень отримуємо компоненти

$$\begin{aligned}
u_j(t, z) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} \text{Нн}_{jk}(t-\tau, z, \xi) [f_k(\tau, \xi) - g_k(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_k d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t [W_{0j}(t-\tau, z) \omega_0(\tau) + W_{lj}(t-\tau, z) \omega_l(\tau)] d\tau + \\
& + \sum_{k=1}^n \int_0^t [R_{jk}^{(1)}(t-\tau, z) \omega_{1k}(\tau) + \text{Нн}_{jk}^{(2)}(t-\tau, z) \omega_{2k}(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{5.107}$$

вектор-функції  $u(t, z) = \{u_1(t, z); u_2(t, z); \dots; u_n(t, z); u_{n+1}(t, z)\}$ , яка повністю визначає єдиний розв'язок крайової задачі (5.98) - (5.101).

Тут головні розв'язки задачі :

- матриця функцій впливу, породжених неоднорідністю системи (5.107) :

$$\text{Нн}_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n+1},$$

- вектор-функції Гріна, породжені крайовими умовами на межах  $z = l_0$  та  $z = l \equiv l_{n+1}$ :

$$\begin{aligned}
W_{0j}(t, z) &= -D_1 \sigma_1 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_1(l_0, \beta_m) V_j(z, \beta_m)}{[\alpha_{11}^0 - \sigma_{11}^0 (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)] \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; \\
W_{lj}(t, z) &= \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_j(z, \beta_m) V_{n+1}(l, \beta_m)}{[\alpha_{22}^{n+1} - \sigma_{22}^{n+1} (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)] \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j = \overline{1, n+1},
\end{aligned}$$

- матриця функцій Гріна, породжених системою інтерфейсних умов  $z = l_k$ .

$$\begin{aligned}
R_{jk}^{(1)}(t, z) &= -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{\tilde{\alpha}_{22}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m) \\
R_{jk}^{(2)}(t, z) &= -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{\tilde{\alpha}_{12}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m).
\end{aligned}$$

Розв'язок (5.107) розглядуваної крайової задачі ми отримали при умові, що

$$\begin{aligned}
\psi_1 &= \delta_{11}^0 g'_1(l_0) + \gamma_{11}^0 g_1(l_0) = 0, \psi_{n+1} = \delta_{22}^{n+1} g'_{n+1}(l_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1}(l_{n+1}) = 0, \\
\psi_{jk} &= \delta_{j1}^k g'_k(l_k) + \gamma_{j1}^k g_k(l_k) - \delta_{j2}^k g'_{k+1}(l_k) + \gamma_{j2}^k g_{k+1}(l_k) = 0.
\end{aligned}$$

У протилежному випадку у розв'язку (5.107) функції  $\omega_0(\tau), \omega_l(\tau), \omega_{jk}(\tau)$  треба замінити відповідно до функції

$$(\omega_0(\tau) + \psi_1 \delta_+(\tau)), (\omega_l(\tau) + \psi_{n+1} \delta_+(\tau)), (\omega_{jk}(\tau) + \psi_{jk} \delta_+(\tau)).$$

Це означає, що в формулі (5.107) з'являться ще доданки

$$W_{0j}(t, z)\psi_1 + W_{lj}(t, z)\psi_{n+1} + \sum_{k=1}^n \left[ R_{jk}^{(1)}(t, z)\psi_{1k} + R_{jk}^{(2)}(t, z)\psi_{2k} \right].$$

**Динамічна гібридна модель.** Побудувати обмежений в області  $D_n$  розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку гіперболічного типу для обмеженого  $(n+1)$ -складового неоднорідного середовища з врахуванням динаміки зміни швидкостей градієнтів визначальних параметрів переносу на краях та інтерфейсних поверхнях  $z = l_j, j = \overline{0, n}$ :

$$\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} + \chi_j^2 u_j - D_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial z^2} = f_j(t, z), z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n+1} \quad (5.108)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z)|_{t=0} = g_{1j}(z), \frac{\partial u_j}{\partial t} \Big|_{t=0} = g_{2j}(z), j = \overline{1, n+1} \quad (5.109)$$

крайовими умовами

$$\left[ \left( \alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t) \quad (5.110)$$

$$\left[ \left( \alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{n+1}(t, z) \Big|_{z=l} = \omega_l(t)$$

та системою інтерфейсних умов:

$$\left\{ \left[ \left( \alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{k+1}(t, z) - \left[ \left( \alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_k(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{jk}(t); \quad (5.111)$$

$$j = \overline{1, 2}, k = \overline{1, n}$$

Запишемо систему (5.108) і початкові умови (5.111) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_1^2 - D_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_1(t, z) \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_2^2 - D_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2(t, z) \\ \dots \\ \left( \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_{n+1}^2 - D_{n+1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \quad (5.112)$$

$$\left[ \begin{array}{c} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{array} \right]_{t=0} = \left[ \begin{array}{c} g_{11}(z) \\ g_{12}(z) \\ \dots \\ g_{1, n+1}(z) \end{array} \right]; \frac{\partial}{\partial t} \left[ \begin{array}{c} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{array} \right]_{t=0} = \left[ \begin{array}{c} g_{21}(z) \\ g_{22}(z) \\ \dots \\ g_{2, n+1}(z) \end{array} \right]$$

В припущенні, що  $\max\{\chi_1^2; \chi_2^2; \dots; \chi_n^2; \chi_{n+1}^2\} = \chi_{n+1}^2$ , застосуємо до задачі (5.112) за правилом множення матриць операторну матрицю - рядок (5.103). Внаслідок тотожності (5.97) одержуємо задачу Коші:

$$\left[ \frac{d^2}{dt^2} + (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2) \right] u_m(t) = F h_m(t); u_m(t)|_{t=0} = g_{1m}, \frac{d}{dt} u_m(t)|_{t=0} = g_{2m}. \quad (5.113)$$

Розв'язком задачі Коші (5.113) є функція

$$u_m(t) = \frac{\sin q_m t}{q_m} g_{2m} + \frac{d}{dt} \frac{\sin q_m t}{q_m} g_{1m} + \int_0^t \frac{\sin q_m(t-\tau)}{q_m} F h_m(\tau) d\tau, q_m = (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)^{1/2}. \quad (5.114)$$

Застосувавши до матриці-елемента  $[u_m(t)]$ , визначеної формулою (5.114), за правилом множення матриць операторну матрицю-стовпець (5.106), після елементарних перетворень одержуємо єдиний розв'язок гіперболічної задачі (5.108) - (5.111):

$$\begin{aligned} u_j(t, z) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} H h_{jk}(t-\tau, z, \xi) [f_k(\tau, \xi) + g_{2k}(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_k d\xi d\tau + \\ & + \sum_{k=1}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \int_{l_{k-1}}^{l_k} H h_{jk}(t, z, \xi) g_{1k}(\xi) \sigma_k d\xi + \\ & + \int_0^t [W_{0j}(t-\tau, z) \omega_0(\tau) + W_{lj}(t-\tau, z) \omega_l(\tau)] d\tau + \\ & + \sum_{k=1}^n \int_0^t [R_{jk}^{(1)}(t-\tau, z) \omega_{1k}(\tau) + R_{jk}^{(2)}(t-\tau, z) \omega_{2k}(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (5.115)$$

Тут головні розв'язки гіперболічної задачі (5.108) - (5.111):

- матриця функцій впливу, породжених неоднорідністю системи (5.108):

$$H_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n+1}$$

- вектор-функції Гріна, породжених крайовими умовами на межах  $z = l_0$  та

$z = l$ :



$$W_{0j}(t, z) = -a_1^2 \sigma_1 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_1(l_0, \beta_m) V_j(z, \beta_m)}{\tilde{\alpha}_{11}^0 \|V(z, \beta_m)\|_1^2};$$

$$W_{ij}(t, z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_{n+1}(l, \beta_m)}{\tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j = 1, \overline{n+1}$$

- та матриці функції Гріна, породжених неоднорідністю системи інтерфейсних умов:

$$R_{jk}^{(1)}(t, z) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{\tilde{\alpha}_{22}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m),$$

$$R_{jk}^{(2)}(t, z) = \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{\tilde{\alpha}_{12}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m).$$

Розв'язок даної гіперболічної крайової задачі побудовано при умові, що

$$\psi_{li} \equiv \delta_{11}^0 g'_i(l_0) + \gamma_{11}^0 g_{il}(l_0) = 0, \psi_{n+1,i} \equiv \delta_{22}^{n+1} g'_{i,n+1}(l_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{i,n+1}(l_{n+1}) = 0,$$

$$\psi_{jk,i}^0 = \delta_{j1}^k g'_{ik}(l_k) + \gamma_{j1}^k g_{ik}(l_k) - \delta_{j2}^k g'_{i,k+1}(l_k) + \gamma_{j2}^k g_{i,k+1}(l_k) = 0, i = 1, 2$$

У протилежному випадку у формулі (5.115) появляться складові

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} W_{0j}(t, x) \psi_{11} + W_{0j}(t, x) \psi_{12} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} W_{ij}(t, x) \psi_{n+1,1} + W_{ij}(t, x) \psi_{n+1,1} +$$

$$+ \sum_{k=1}^n \left\{ \left[ \frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{jk}^{(1)}(t, x) \psi_{1k,1} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{jk}^{(2)}(t, x) \psi_{2k,1} \right] + \left[ R_{jk}^{(1)}(t, x) \psi_{1k,2} + R_{jk}^{(2)}(t, x) \psi_{2k,2} \right] \right\}.$$

### 5.3. Інтегральне перетворення Фур'є для напівобмежених неоднорідних $n$ -складових середовищ

Запровадимо інтегральне перетворення, породжене на множині

$$I_n^t = \left\{ z : z \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (l_{j-1}, l_j); l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\} \text{ диференціальним оператором Фур'є}$$

другого порядку:

$$L_n = \left[ \sum_{k=1}^n D_k \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + D_{n+1} \theta(z - l_n) \right] \frac{d^2}{dz^2} \quad (5.116)$$

у припущені, що для будь-якої вектор функції

$$g(z) = \{g_1(z), g_2(z), \dots, g_n(z), g_{n+1}(z)\} \text{ із області визначення оператора } L_n$$

справджуються крайові умови:

$$\left( \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) g_1(z) \Big|_{x=l_0} = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d^m g_{n+1}}{dz^m} = 0, \quad m = 0, 1 \quad (5.117)$$

та системи інтерфейсних умов:

$$\left[ \left( \tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k - \left( \tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1} \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \quad j=1,2; \quad k=\overline{1,n}. \quad (5.118)$$

Розглянемо задачу про конструкцію обмеженого в області  $D_n^+ = \{(t, z) : t \in (0, \infty), z \in I_n^+\}$  розв'язку системи диференціальних рівнянь в частинних похідних поширення хвильового сигналу [12]

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \gamma_j^2 - D_j \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u_j(t, x) = 0, \quad z \in (l_{j-1}, l_j), \quad j = \overline{1, n}, \quad l_{n+1} = \infty \quad (5.119)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z) \Big|_{t=0} = g_j(z), \quad z \in (l_{j-1}, l_j), \quad j = \overline{1, n} \quad (5.120)$$

та крайовими умовами

$$\left[ \left( \alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1 \Big|_{z=l_0} = 0; \quad \frac{\partial u_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (5.121)$$

та системою інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} & \left( L_{j1}^k [u_k] - L_{j2}^k [u_{k+1}] \right) \Big|_{z=l_k} \equiv \left\{ \left[ \left( \alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_k(t, z) - \right. \\ & \left. - \left[ \left( \alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = 1, 2 \end{aligned} \quad (5.122)$$

Припустимо, що вектор-функція  $u(t, z) = \{u_1(t, z), u_2(t, z), \dots, u_{n+1}(t, z)\}$  є оригіналом за Лапласом стосовно  $t$  [29]. У зображенні за Лапласом задачі (5.116) - (5.122) відповідає задача побудови обмеженого на множині  $I_1^+$  розв'язку сепараторної системи звичайних диференціальних рівнянь Фур'є другого порядку для модифікованих функцій

$$\left( \frac{d^2}{dz^2} - q_j^2 \right) u_j^*(p, z) = -\bar{g}_j(z); \quad j = \overline{1, n+1} \quad (5.123)$$

за крайовими умовами:

$$\left( \bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) u_1^* \Big|_{z=l_0} = g_0; \quad \frac{du_{n+1}^*}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (5.124)$$

та системою інтерфейсних умов

$$\left[ \left( \alpha_{j1}^{-1} \frac{d}{dx} + \beta_{j1}^{-1} \right) u_1^*(p, x) - \left( \alpha_{j2}^{-1} \frac{d}{dx} + \beta_{j2}^{-1} \right) u_2^*(p, x) \right]_{x=l_j} = \psi_{j1}, j=1,2 \quad (5.125)$$

Тут:

$$\bar{g}_j = D_j^{-1} g_j(z); q_j = D_j^{-1/2} (p + \gamma_j^2)^{1/2}, D_j > 0, \gamma_j^2 \geq 0, \text{Re} q_j > 0;$$

$$\bar{\alpha}_{ji}^m = \alpha_{ji}^m + \delta_{ji}^m p, \bar{\beta}_{ji}^m = \beta_{ji}^m + \gamma_{jk}^m p; m = \overline{0, n}; j, k = 1, 2;$$

$$g_0 = \delta_{11}^0 g_1'(l_0) + \gamma_{11}^0 g_1(l_0); \psi_{jk} = \delta_{j1}^k q_k'(l_k) + \gamma_{j1}^k g_k(l_k) - (\delta_{j2}^k g_{k+1}'(l_k) + \gamma_{j1}^k q_k(l_k)), j=1, 2.$$

Заміною змінних задача (5.123) - (5.125) легко зводиться до задачі з однорідними крайовими умовами ( $g_0 = 0$ ) і однорідною системою інтерфейсних умов ( $\psi_{j1} = 0; j = \overline{1, n}$ ).

Фундаментальну систему розв'язків для диференціального рівняння Фур'є  $\left( \frac{d^2}{dz^2} - q^2 \right) V = 0$  утворюють функції  $\exp(qz)$  та  $\exp(-qz)$  або їх лінійні комбінації  $V_1 = ch(qz)$  та  $V_2 = sh(qz)$ .

Зафіксувавши гілку  $\text{Re} q_k(p) > 0$ , розв'язок неоднорідної крайової задачі (5.116) - (5.118) побудуємо методом функцій Коші [12, 20]:

$$u_k^*(p, z) = A_k \cdot ch q_k z + B_k \cdot sh q_k z + \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) F_k^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n}; \quad (5.126)$$

$$u_{n+1}^*(p, z) = B_{n+1} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} E_{n+1}^*(p, z, \xi) F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi; \quad (5.127)$$

де  $E_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n+1}$  - функції Коші, що задовольняють умови:

$$\begin{cases} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0 \\ \frac{d}{dz} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} E_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = -1. \end{cases} \quad (5.128)$$

Функції Коші  $E_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n}$  шукаємо у вигляді:

$$E_k^*(p, z, \xi) = \begin{cases} E_k^{-*} = D_{1k} ch q_k z + E_{1k} sh q_k z; l_k < z < \xi < l_{k+1} \\ E_k^{+*} = D_{2k} ch q_k z + E_{2k} sh q_k z; l_k < \xi < z < l_{k+1} \end{cases}, \quad (5.129)$$

що задовольняють ще додаткові однорідні умови:

$$\left( \bar{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^k \right) E_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0; \left( \bar{\alpha}_{11}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^k \right) E_k^{+*} \Big|_{z=l_k-0} = 0, k = \overline{1, n}. \quad (5.130)$$

Функцію Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$  шукаємо у вигляді

$$E_{n+1}^*(p, z, \xi) = \begin{cases} E_{n+1}^{-*} = D_{1_{n+1}} chq_{n+1}z + E_{1_{n+1}} shq_{n+1}z; l_n < z < \xi < \infty \\ E_{n+1}^{+*} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(z-l_n)}; l_n < \xi < z < \infty \end{cases}, \quad (5.131)$$

що задовольняє додаткову умову

$$\left( \bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^n \right) E_{n+1}^{-*} \Big|_{z=l_n+0} = 0. \quad (5.132)$$

Знаходимо функції Коші  $E_k^*(p, z, \xi); k = \overline{1, n}$ . З умови (5.128) отримаємо:

$$\left[ \square_k^{+*}(p, z, \xi) - \square_k^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=l_k} = (D_{2_k} - D_{1_k}) chq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) shq_k \xi = 0$$

$$\frac{1}{q_k} \frac{d}{dz} \left[ \square_k^{+*}(p, z, \xi) - \square_k^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=l_k} = (D_{2_k} - D_{1_k}) shq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) chq_k \xi = -\frac{1}{q_k}$$

Отже, відносно  $(D_{2_k} - D_{1_k})$  та  $(E_{2_k} - E_{1_k})$  отримуємо алгебраїчну систему:

$$\begin{aligned} (D_{2_k} - D_{1_k}) chq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) shq_k \xi &= 0; \\ (D_{2_k} - D_{1_k}) shq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) chq_k \xi &= -\frac{1}{q_k}. \end{aligned} \quad (5.133)$$

Звідси одержуємо співвідношення:

$$(D_{2_k} - D_{1_k}) = \frac{1}{q_k} shq_k \xi; (E_{2_k} - E_{1_k}) = -\frac{1}{q_k} chq_k \xi \quad (5.134)$$

З інтерфейсних умов (5.130) маємо рівності:

$$\begin{aligned} \left( \bar{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^k \right) E_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}} &= D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) = 0 \\ \left( \bar{\alpha}_{11}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^k \right) E_k^{+*} \Big|_{z=l_k} &= D_{2_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{2_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) = 0 \end{aligned} \quad (5.135)$$

Підставивши в перше рівняння системи (5.135) значення  $D_{2_k}, E_{2_k}$ , із співвідношень (5.134), отримуємо систему рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів  $D_{1_k}, E_{1_k}$ :

$$D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) = 0$$

$$D_{1_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) = \frac{1}{q_k} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi).$$

Звідси знаходимо:

$$D_{1_k} = \frac{\begin{vmatrix} 0 & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ \frac{1}{q_k} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) & V_{11}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) & V_{11}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix}} = -\frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi)}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1})$$

$$E_{1_k} = \frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1})}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)}.$$

Цим функція Коші  $E_k^*(p, z, \xi); k = \overline{1, n}$  визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі  $z = \xi$  має таку структуру:

$$E_k^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), & l_{k-1} < z < \xi < l_k \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z), & l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases} \quad (5.136)$$

тут

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = \begin{cases} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}); & k = \overline{2, n} \\ \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1); & k = 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{j1}^1(q_1 l_0, q_1 l_1) = V_{11}^{01}(q_1 l_0) \cdot V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{11}(q_1 l_1) \cdot V_{11}^{0,2}(q_1 l_0)$$

Обчислимо вираз для функції Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$ . З умови (5.132) знаходимо додаткове рівняння:

$$\left( \bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^n \right) E_{n+1}^*(p, z, \xi) \Big|_{z=l_n} = D_{1_{n+1}} V_{12}^{n1}(q_{n+1} l_n) + E_{1_{n+1}} V_{12}^{n2}(q_{n+1} l_n) = 0. \quad (5.137)$$

Внаслідок умов (5.128) отримуємо алгебраїчну систему:

$$\left[ E_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - E_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} - (D_{1_{n+1}} \cdot ch q_{n+1} \xi + E_{1_{n+1}} \cdot sh q_{n+1} \xi) = 0. \quad (5.138)$$

$$\frac{d}{dz} \left[ E_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - E_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = -q_{n+1} E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} - q_{n+1} (D_{1_{n+1}} sh q_{n+1} \xi + E_{1_{n+1}} ch q_{n+1} \xi) = -1.$$

Із системи (5.130) отримуємо:

$$D_{1_{n+1}} = \frac{\begin{vmatrix} E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} & shq_{n+1}\xi \\ \frac{1}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} & chq_{n+1}\xi \end{vmatrix}}{ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi} =$$

$$= -\frac{shq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} + E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n} [ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi] = -\frac{shq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} + E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n};$$

$$E_{1_{n+1}} = \frac{\begin{vmatrix} chq_{n+1}\xi & D_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \\ shq_{n+1}\xi & \frac{1}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \end{vmatrix}}{ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi} = \frac{chq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n}.$$

Підставивши  $D_{1_{n+1}}, E_{1_{n+1}}$  в (5.137), одержуємо:

$$E_{2_{n+1}} = -\frac{1}{q_{n+1}} [V_{12}^{n2}(q_{n+1}l_n)chq_{n+1}\xi - V_{12}^{n1}(q_{n+1}l_n)shq_{n+1}\xi]^*$$

$$* \frac{e^{-q_{n+1}l_n}}{V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi)} = \frac{\Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}\xi)}{q_{n+1} \cdot (\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)}.$$

Тут

$$V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi) = \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} shq_{n+1}l_n + \bar{\beta}_{12}^n chq_{n+1}l_n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} chq_{n+1}l_n - \bar{\beta}_{12}^n shq_{n+1}l_n =$$

$$= (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1})(chq_{n+1}l_n - shq_{n+1}l_n) = (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1})e^{-q_{n+1}l_n}.$$

Цим функція Коші  $E_{n+1}^*(p, z, \xi)$  визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі  $z = \xi$  має таку структуру:

$$\square_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_{n+1}(\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}, l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1}l_n, q_{n+1}\xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z-l_n)}, l_n < \xi < z < \infty \end{cases}. \quad (5.139)$$

В результаті розв'язання відповідних систем алгебраїчних рівнянь для знаходження невідомих  $D_{i_k}, E_{i_k}, E_{i_{n+1}}; k = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$ , функції Коші будуть визначені і внаслідок симетрії відносно діагоналі  $z = \xi$  матимуть структуру:

$$\square_k^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_k A_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), l_{k-1} < z < \xi < l_k \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z), l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases}, k = \overline{1, n}$$

$$\square_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{I}{q_{n+1}(\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} \xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z - l_n)}, l_n < \xi < z < \infty \end{cases} \quad (5.140)$$

Тут :

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = \begin{cases} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}); & k = \overline{2, n} \\ \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1); & k = 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{j1}^1(q_1 l_0, q_1 l_1) = V_{11}^{01}(q_1 l_0) \cdot V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{11}(q_1 l_1) \cdot V_{11}^{0,2}(q_1 l_0)$$

$$V_{ij}^{k1}(q_s l_k) = \left( \bar{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{ij}^k \right) chq_s z \Big|_{z=l_k} = \bar{\alpha}_{ij}^k q_s shq_s l_k + \bar{\beta}_{ij}^k chq_s l_k$$

$$V_{ij}^{k2}(q_s l_k) = \left( \bar{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{ij}^k \right) shq_s z \Big|_{z=l_k} = \bar{\alpha}_{ij}^k q_s chq_s l_k + \bar{\beta}_{ij}^k shq_s l_k;$$

$$\Phi_{ij}^k(q_s l_k, q_s z) = V_{ij}^{k2}(q_s l_k) chq_s z - V_{ij}^{k1}(q_s l_k) shq_s z.$$

При відомих функціях Коші  $E_k^*(p, z, \xi)$  крайова умова в точці  $z = l_0$  та умови інтерфейсу (5.7) для визначення невідомих коефіцієнтів  $A_k, B_k (k = \overline{1, n})$  та  $B_{n+1}$ , що беруть участь у структурах (5.126) - (5.127) загального розв'язку крайової задачі (5.123) - (5.125), дають алгебраїчну систему із  $(2n+1)$  – го рівняння:

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{12}^{01}(q_1 l_0) A_1 + V_{12}^{02}(q_1 l_0) B_1 = 0 \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{11}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1) B_2 = 0 \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{21}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1) B_2 = G_1^* \\ \text{-----} \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{11}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{12}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{12}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = 0 \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{21}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{22}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{22}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = G_k^* \\ \text{-----} \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{11}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) B_{n+1} = 0 \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{21}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{22}^n - \bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1}) B_{n+1} = G_n^* \end{array} \right. \quad (5.141)$$

Функції  $G_k^*$ , що беруть участь в системі (5.134) мають вигляд:

$$G_k^* = c_{2k} \int_{l_k}^{l_{k+1}} \frac{\Phi_{11}^{k+1}(q_{k+1} l_{k+1}, q_{k+1} \xi)}{\Delta_{11}(q_{k+1} l_k, q_{k+1} l_{k+1})} F_{k+1}^*(p, \xi) d\xi - c_{1k} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi)}{\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} F_k^*(p, \xi) d\xi, k = \overline{1, n-1}$$

$$G_n^* = c_{2_n} \int_{l_n}^{\infty} \frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}} F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi - c_{1_n} \int_{l_{n-1}}^{l_n} \frac{\Phi_{12}^{n-1}(q_n l_{n-1}, q_n \xi)}{\Delta_{11}(q_n l_{n-1}, q_n l_n)} F_n^*(p, \xi) d\xi. \quad (5.142)$$

Тут  $c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2_j}^k \cdot \bar{\beta}_{1_j}^k - \bar{\alpha}_{1_j}^k \cdot \bar{\beta}_{2_j}^k; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}$ .

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі (5.123) - (5.125): для  $p = \sigma + iz$  із  $\text{Re } p = \sigma \geq \sigma_0$  де  $\sigma_0$  - абсциса збіжності інтегралу Лапласа та  $\text{Im } p = \tau \in (-\infty, +\infty)$  визначник алгебраїчної системи (5.141) системи є відмінним від нуля:

$$\Delta^*(p) = (\bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \Delta_{\overline{1, 2n}} - (\bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \Delta_{\overline{1, 2n}} \neq 0. \quad (5.143)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (5.134) і підстановки одержаних значень  $A_k, B_k; k = \overline{1, n}$  та  $B_{n+1}$  у формулами (5.126), (5.135), одержуємо єдиний розв'язок крайової задачі (5.116) - (5.118) у вигляді:

$$u_k^*(p, z) = \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} H_{k,j}^*(p, z, \xi) \cdot \bar{g}_j(\xi) d\xi; k = \overline{1, n+1}; l_{n+1} = \infty. \quad (5.144)$$

Тут елементи матриці функції впливу  $[H_{ij}^*(p, z, \xi)]$ ,  $i, j = \overline{1, n+1}$ :

$$\square_{11}^*(p, z, \xi) = \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)}{q_1 \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{\overline{1, 2}} - \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A_{\overline{1, 2}} \right];$$

$$H_{1j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=1}^{j-1} q_s c_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{\overline{1, 2j}} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{\overline{1, 2j}} \right]; j = \overline{2, n};$$

$$H_{1, n+1}^*(p, z, \xi) = - \frac{\prod_{s=1}^n q_s c_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)};$$

$$\square_{k1}^*(p, z, \xi) = \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi)}{q_1 \Delta^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} c_{1_s} q_s \cdot \left[ \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) \cdot A'_{\overline{1, 2k}} - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) \cdot A_{\overline{1, 2k}} \right];$$

$$\square_{kj}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^{k-1} q_s c_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{\overline{1, 2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{\overline{1, 2k}} \right] \cdot$$

$$\cdot \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \cdot \Delta'_{\overline{1, 2j-2}} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta'_{\overline{1, 2j-2}} \right]; j = \overline{2, k-1}$$



$$H_{j=\overline{k+1},n}^* (p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=k}^{s-1} q_s c_{2s}}{q_k \cdot \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} \right] \cdot \\ \cdot \left[ \Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right];$$

$$H_{kk}^* (p, z, \xi) = \frac{1}{q_k \cdot \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] \cdot \\ \cdot \left[ \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot A'_{1,2k} \right];$$

$$H_{k,n+1}^* (p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=k}^n q_s c_{2s}}{q_k \Delta^*(p)} \left[ \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}, k = \overline{1, n}$$

$$H_{n+1,1}^* (p, z, \xi) = -\frac{1}{q_1 \Delta^*(p)} \prod_{s=1}^n c_{1s} q_s \cdot \Phi_{12}^0(q, l_0, q, \xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z-l_n)};$$

$$\square_{n+1,j}^* (p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^n c_{1s} q_s}{q_j \cdot \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} \left[ \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right], j = \overline{2, n};$$

$$H_{n+1,n+1}^* (p, z, \xi) = -\frac{1}{q_{n+1} \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \cdot \left[ \Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{1,2n} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{1,2n} \right].$$

Тут  $A_{\overline{1,2k}}$  – визначник, утворений з визначника системи  $\Delta^*(p)$  шляхом викреслювання перших  $2k$  рядків і стовпців (під номерами  $\overline{1,2k}$ ,  $k = \overline{1, n}$ );  $A'_{\overline{1,2k}}$  – визначник, утворений з визначника системи  $\Delta^*(p)$  шляхом викреслювання перших  $2k+1$  рядків за виключенням  $2k$ -го (під номерами  $\overline{1,2k-1,2k+1}$ ;  $k = \overline{1, n}$ ) і перших  $2k$  стовпців (під номерами  $\overline{1,2k}$ ,  $k = \overline{1, n}$ );  $\Delta_{\overline{1,2k}}$  – визначник, утворений з перших  $2k$  рядків і стовпців (під номерами  $\overline{1,2k}$ ,  $k = \overline{1, n}$ ) визначника системи  $\Delta^*(p)$ ;  $\Delta'_{\overline{1,2k}}$  – визначник, утворений з перших  $2k+1$  рядків за виключенням  $2k$ -го (під номерами  $\overline{1,2k-1,2k+1}$ ;  $k = \overline{1, n}$ ) і перших  $2k$  стовпців (під номерами  $\overline{1,2k}$ ,  $k = \overline{1, n}$ ) визначника системи.

Рекурентні алгоритми обчислення визначників  $A_{\overline{1,2k}}$ ,  $A'_{\overline{1,2k}}$ ,  $\Delta_{\overline{1,2k}}$ ,  $\Delta'_{\overline{1,2k}}$  та елементів матриці  $[H_{ij}^*(p, z, \xi)]$ ,  $i, j = \overline{1, n+1}$  подані в [20].

Особливими точками функцій впливу крайової задачі (5.119) -(5.123)

$H_{k,k_1}^*(p, z, \xi), k, k_1 = \overline{1, n+1}$  є точки галуження  $p = -\gamma_k^2, k = \overline{1, n+1}$  та  $p = \infty$ .

Внаслідок Леми Жордана і теореми Коші [29] маємо такі формули для знаходження оригіналів функцій впливу  $H_{k,k_1}^*(p, z, \xi), k, k_1 = \overline{1, n+1}$ :

$$\square_{k,k_1}(t, z, \xi) = L^{-1} \left[ \square_{k,k_1}^*(p, z, \xi) \right] = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \square_{k,k_1} \left[ \square_{k,k_1}^*(-(\beta^2 + \gamma^2), z, \xi) \right] \cdot e^{-(\beta^2 + \gamma^2)} \beta d\beta. \quad (5.145)$$

Ми припустили, що  $\gamma^2 = \max \{ \gamma_k^2 \}_{k=1}^{n+1}$  і поклали  $q_k = ib_k$ , де  $b_k = (\beta^2 + k^2)^{1/2} D^{-1/2}_k$ ,  $k^2_k = \gamma^2 - \gamma_k^2 \geq 0, k = \overline{1, n+1}$ . Безпосередньо підраховуючи, одержуємо:

$$\Delta_{m1}(ib_k l_{k-1}, ib_k l_k) = i \cdot \delta_{m1}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \equiv i \cdot [v_{m2}^{k-1,1}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{11}^{k2}(b_k l_k) - v_{m2}^{k-1,2}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{11}^{k1}(b_k l_k)]$$

$$\Delta_{m2}(ib_k l_{k-1}, ib_k l_k) = i \cdot \delta_{m2}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \equiv i \cdot [v_{m2}^{k-1,1}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{21}^{k2}(b_k l_k) - v_{m2}^{k-1,2}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{21}^{k1}(b_k l_k)]$$

$$\Delta_{m1}(ib_1 l_0, ib_1 l_1) = i \cdot \delta_{m1}(b_1 l_0, b_1 l_1) \equiv i \cdot [v_{11}^{01}(b_1 l_0) \cdot v_{m1}^{12}(b_1 l_1) - v_{11}^{02}(b_1 l_0) v_{m1}^{11}(b_1 l_1)]; m = \overline{1, 2}$$

$$\Delta_{\overline{1,2}}(ib_1) = i \cdot \delta_{\overline{1,2}}(\beta) \equiv i \cdot \delta_{11}(b_1 l_0, b_1 l_1); \Delta'_{\overline{1,2}}(ib_1) = i \cdot \delta_{\overline{1,2}}(\beta) \equiv i \cdot \delta_{21}(b_1 l_0, b_1 l_1)$$

$$\Delta_{\overline{1,2k}}(i\beta) = i^k \cdot [\delta_{11}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta'_{\overline{1,2k-2}}(\beta) - \delta_{21}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta_{\overline{1,2k-2}}(\beta)] \equiv i^k \cdot \delta_{\overline{1,2k}}(\beta)$$

$$\Delta'_{\overline{1,2k}}(i\beta) = i^k \cdot [\delta_{12}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta'_{\overline{1,2k-2}}(\beta) - \delta_{22}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta_{\overline{1,2k-2}}(\beta)] \equiv i^k \cdot \delta_{\overline{1,2k}}(\beta)$$

$$\Delta^*(-(\beta^2 + \gamma^2)) = i^n \cdot \left[ (i \cdot \bar{\alpha}_{22}^n \cdot b_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \delta_{\overline{1,2n}}(\beta) - (i \cdot \bar{\alpha}_{12}^n \cdot b_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n) \delta'_{\overline{1,2n}}(\beta) \right] =$$

$$= i^n \cdot \left\{ \left[ \bar{\beta}_{12}^n \delta'_{\overline{1,2n}}(\beta) - \bar{\beta}_{22}^n \delta_{\overline{1,2n}}(\beta) \right] - i \cdot b_{n+1} \left[ \bar{\alpha}_{12}^n \cdot \delta'_{\overline{1,2n}}(\beta) - \bar{\alpha}_{22}^n \cdot \delta_{\overline{1,2n}}(\beta) \right] \right\}$$

$$V_{jm}^{k1}(i \cdot q_s l_k) = v_{jm}^{k1}(b_s l_k); V_{jm}^{k2}(i \cdot q_s l_k) = i \cdot v_{jm}^{k2}(b_s l_k); \Phi_{jm}^k(i \cdot b_s l_k, i \cdot b_s z) = i \cdot \varphi_{jm}^k(b_s l_k, b_s z), j, m = \overline{1, 2}$$

$$v_{jm}^{k1}(b_s l_k) = -\alpha_{jm}^k b_s \sin b_s l_k + \beta_{jm}^k \cos b_s l_k; v_{jm}^{k2}(b_s l_k) = \alpha_{jm}^k b_s \cos b_s l_k + \beta_{jm}^k \sin b_s l_k;$$

$$\varphi_{jm}^k(b_s l_k, q_s z) = v_{jm}^{k2}(b_s l_k) \cos b_s z - v_{jm}^{k1}(b_s l_k) \sin b_s z;$$

$$\bar{\alpha}_{jm}^k = \alpha_{jm}^k - \delta_{jm}^k (\beta^2 + \gamma^2); \bar{\beta}_{jm}^k = \beta_{jm}^k - \gamma_{jm}^k (\beta^2 + \gamma^2).$$

Визначаємо числові матриці  $A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k & \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k & \beta_{2j}^k \end{bmatrix}, A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k & \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k & \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}, j = 1, 2; k = \overline{1, n}$ ; та

числові величини:

$$c_{j1,k} = -\det A_{j1,k} \equiv \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k; c_{j2,k} = -\det A_{j2,k} \equiv \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k$$

$$c_{j1,j2}^{12,k} = \alpha_{1j}^k \gamma_{2j}^k - \alpha_{2j}^k \gamma_{1j}^k; c_{j1,j2}^{21,k} = \beta_{1j}^k \delta_{2j}^k - \beta_{2j}^k \delta_{1j}^k.$$

Оскільки  $\bar{c}_{jk} = c_{1j,k} + (c_{j1,j2}^{21,k} - c_{j1,j2}^{12,k})p + c_{j2,k}p^2$ , то вимагаємо виконання рівностей  $c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}$ ,  $c_{j2,k} = 0$ ,  $j = 1, 2$ ;  $k = \overline{1, n}$ . Стосовно чисел  $c_{j1,k}$  будемо вимагати, щоб  $c_{11,k}c_{21,k} > 0$ .

Визначимо функції:

$$V_1(z, \beta) = c_{21,1}b_2 \cdot [\omega_{02}(\beta) \cos b_1 z - \omega_{01}(\beta) \sin b_1 z]; \quad (5.146)$$

$$V_k(z, \beta) = \left( \prod_{j=k}^n c_{21,j} b_{j+1} \right) \cdot [\omega_{k-1,2}(\beta) \cos b_k z - \omega_{k-1,1}(\beta) \sin b_k z]; \quad (5.147)$$

$$V_{n+1}(z, \beta) = \omega_{n,2}(\beta) \cos b_{n+1} z - \omega_{n+1,1}(\beta) \sin b_1 z; \quad (5.148)$$

Тут

$$\omega_{01}(\beta) = v_{11}^{01}(b_1 l_0); \omega_{02}(\beta) = v_{11}^{02}(b_1 l_0);$$

$$\omega_{km}(\beta) = \omega_{k-1,2}(\beta) \cdot \psi_{1m}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k) - \omega_{k-1,1}(\beta) \cdot \psi_{2m}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k); \quad (5.149)$$

$$\psi_{jm}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k) = v_{11}^{kj}(b_k l_k) \cdot v_{22}^{km}(b_{k+1} l_k) - v_{21}^{kj}(b_k l_k) \cdot v_{12}^{km}(b_{k+1} l_k)$$

Введемо до розгляду спектральну функцію

$$V(z, \beta) = \sum_{k=1}^n V_k(z, \beta) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + V_{n+1}(z, \beta) \theta(z - l_n), \quad (5.150)$$

спектральну густину

$$\Omega_n(\beta) = \frac{\beta}{b_{n+1} \cdot [\omega_{n,1}(\beta)^2 + \omega_{n,2}(\beta)^2]} \quad (5.151)$$

та вагову функцію

$$\sigma(z) = \sum_{k=1}^n \sigma_k(z, \beta) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + \sigma_{n+1}(z, \beta) \theta(z - l_n) \quad (5.152)$$

$$\sigma_k = \prod_{j=k}^n \frac{c_{11,j}}{c_{21,j}} \frac{1}{D_k}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{c_{11,n}}{c_{21,n}} \frac{1}{D_n}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}. \quad (5.153)$$

У результаті виконання зазначених в формулі (5.145) операцій маємо оригінали елементів матриці функцій впливу:

$$H_{jk}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_j(z, \beta) V_k(\xi, \beta) \Omega_n(\beta) \sigma_k D_k d\beta; j, k = \overline{1, n+1}. \quad (5.154)$$

Повертаючись у формулах (5.144) до оригіналів, одержуємо єдиний розв'язок параболічної крайової задачі (5.119)–(5.123):

$$u_k(t, z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_k(z, \beta) \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} V_{k_1}(\xi, \beta) g_{k_1}(\xi) \sigma_{k_1} d\xi \cdot \Omega_n(\beta) d\beta, \quad (5.155)$$

$$j = \overline{1, n+1}, l_{n+1} = \infty$$

Звідси внаслідок початкових умов (5.120) отримуємо інтегральне зображення:

$$g_k(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty V_k(z, \beta) \Omega_n(\beta) \int_{l_{k-1}}^{l_k} V_k(\xi, \beta) g_k(\xi) \sigma_{k_1} d\xi d\beta. \quad (5.156)$$

Якщо покласти  $g(z) = \sum_{k=1}^n \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) g_k(z) + \Theta(z - l_n) g_{n+1}(z)$  та спектральні функції густину, визначені (5.153), (5.154), то інтегральне зображення (5.155) можна записати в інваріантній формі:

$$g(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty V(z, \beta) \Omega_n(\beta) \int_{l_0}^\infty V(\xi, \beta) g(\xi) \sigma(\xi) d\xi d\beta \quad (5.157)$$

Інтегральне зображення (5.155) визначає пряме  $F_{+,n+1}$  та обернене  $F_{+,n+1}^{-1}$  інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром для  $n$ -складового неоднорідного середовища :

$$F_{+,n+1}[g(z)] = \int_{l_0}^\infty g(z) V(z, \beta) \sigma(z) dz \equiv \tilde{g}(\beta), \quad (5.158)$$

$$F_{+,n+1}^{-1}[\tilde{g}(\beta)] = \int_0^\infty \tilde{g}(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \equiv g(z). \quad (5.159)$$

Математичним обґрунтуванням запровадженого формулами (5.150) (5.151) інтегрального перетворення Фур'є є твердження:

**Теорема 5.3.1** (про інтегральне зображення): *Якщо вектор-функція  $g(z)$  неперервна, абсолютно сумовна й має обмежену варіацію на множині  $(l_0, \infty)$ , то для будь-якого  $z \in I_n^+$  справедливе інтегральне зображення (5.150).*

**Доведення:** Функції  $V_j(z, \beta)$  та  $V_j(z, \lambda)$  за побудовою задовольняють диференціальні рівняння:

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + (\beta^2 + k_j^2) D_j \right] V_j(z, \beta) = 0, \quad (5.160)$$

$$\left[ \frac{d^2}{dz^2} + (\lambda^2 + k_j^2) D_j \right] V_j(z, \lambda) = 0. \quad (5.161)$$

Помножимо рівність (5.133) на функцію  $V_j(z, \lambda)$ , а рівність (5.160) на функцію  $V_j(z, \beta)$  і віднімемо від першої другу:

$$V_j(z, \beta)V_j(z, \lambda) = \frac{D_j}{\beta^2 + \lambda^2} \frac{d}{dz} \left[ V_j(z, \beta) \frac{d}{dz} V_j(z, \lambda) - V_j(z, \lambda) \frac{d}{dz} V_j(z, \beta) \right]. \quad (5.162)$$

Задамо досить велике число  $A > l_n$ . Внаслідок властивостей функцій  $V_j(z, \beta)V_j(z, \lambda)$ , структури сталих  $\sigma_k$  і рівності (5.152) маємо, що

$$\int_{l_0}^A V(x, \beta)V(x, \lambda)\sigma(x)dx = \frac{1}{\beta^2 - \lambda^2} \left[ V_{n+1}(A, \beta) \frac{d}{dx} V_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) \frac{d}{dx} V_{n+1}(A, \beta) \right] \quad (5.163)$$

Позаінтегральний член в точці  $z = l_0$  рівний нулю внаслідок виконання крайової умови в точці  $z=l_0$  функцією  $V_1(z, \dots)$ , позаінтегральні члени в точках  $z = l_k$  перетворюється в нуль внаслідок вибору  $\sigma_k$ , та інтерфейсних умов (нагадаємо, що  $g_0=0$ ,  $\psi_{jk}=0$ ,  $j=1,2$ ;  $k = \overline{1, n}$ ). Для довільних додатних чисел  $c$  і  $d$  ( $c < d$ ) та довільної обмеженої на сегменті  $[c, d]$  функції  $\psi(\beta)$ , обчислимо подвійний інтеграл

$$\begin{aligned} J_n &= \frac{2}{\pi} \int_{l_0}^c \int_c^d \psi(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta V(z, \lambda) \sigma(z) = \\ &= \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \int_{l_0}^c \int_c^d g(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta V(z, \lambda) \sigma(z). \end{aligned} \quad (5.164)$$

Внаслідок рівності (5.163) подвійний інтеграл (5.164) набуває вигляду:

$$J_n = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \int_c^d \frac{\psi(\beta)}{\beta^2 - \lambda^2} \left[ V_{n+1}(A, \beta) V'_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) V'_{n+1}(A, \beta) \right] \Omega_n(\beta) d\beta. \quad (5.165)$$

Безпосередньо отримуємо:

$$\begin{aligned} &2 \left[ V_{n+1}(A, \beta) V'_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) V'_{n+1}(A, \beta) \right] = z_{n+1}^- \left[ \omega_{n2}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) - \omega_{n1}(\beta) \omega_{n1}(\lambda) \right] \sin z_{n+1}^+ A + \\ &+ z_{n+1}^+ \left[ \omega_{n1}(\beta) \omega_{n1}(\lambda) + \omega_{n2}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) \right] \sin z_{n+1}^- A + z_{n+1}^- \left[ \omega_{n1}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) + \omega_{n1}(\lambda) \omega_{n2}(\beta) \right] \cos z_{n+1}^+ A + \\ &+ z_{n+1}^+ \left[ \omega_{n1}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) - \omega_{n1}(\lambda) \omega_{n2}(\beta) \right] \cos z_{n+1}^- A; z_{n+1}^\pm = b_{n+1}(\beta) \pm b_{n+1}(\lambda). \end{aligned} \quad (5.166)$$

У припущенні, що функція  $\psi(\beta)$  неперервна, абсолютно інтегрована й має обмежену варіацію на множині  $[c, d]$ , підстановка (5.158) в (5.157) з наступним використанням лем Рімана й Дирихле [12] приводить до рівності

$$\frac{2}{\pi} \int_{l_0}^{\infty} \int_c^d \psi(\beta) V(z, \beta) V(z, \lambda) \Omega_n(\beta) d\beta \sigma(z) dz = \begin{cases} \psi(\lambda), & \lambda \in [c, d], \\ 0, & \lambda \notin [c, d]. \end{cases} \quad (5.167)$$

Якщо ж функція  $\psi(\beta)$  володіє вище вказаними властивостями на проміжку  $(0, \infty)$ , то одержуємо, що

$$\frac{2}{\pi} \int_{l_0}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(\beta) V(z, \beta) V(z, \lambda) \Omega_n(\beta) d\beta \sigma(z) dz = \begin{cases} \psi(\lambda), & \lambda \in (0, \infty), \\ 0, & \lambda \notin (0, \infty). \end{cases} \quad (5.168)$$

Припустимо, що вектор - функція  $g(z)$  має вигляд

$$g(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \psi(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta. \quad (5.169)$$

Помножимо (5.168) на  $V(z, \lambda) \sigma(z) dz$ , де  $\lambda$  - довільне додатне число і проінтегруємо від  $z=l_0$  до  $z=\infty$ . На основі рівності (5.168) одержимо, що

$$\int_{l_0}^{\infty} g(z) V(z, \lambda) \sigma(z) dz = \psi(\lambda) S_+(\lambda); \quad S_+(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0. \end{cases}$$

Якщо тепер підставити функцію  $g(\beta) = \int_{l_0}^{\infty} f(\xi) V(\xi, \beta) \sigma(\xi) d\xi$  в рівність (5.169), то одержимо формулу (5.155) - інтегральне зображення вектор- функції  $g(z) = \{g_1(z), g_2(z), \dots, g_{n+1}(z)\}$ . Доведення теореми завершено.

З метою застосування одержаного інтегрального перетворення для побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей одержимо основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $L_n$ .

**Теорема 5.3.2** (про основну тотожність). Нехай виконуються співвідношення:

$$C_{11,k} \cdot C_{21,k} > 0, \quad C_{j2,k} = 0, \quad C_{j1,j2}^{21,k} = C_{j1,j2}^{12,k}; \quad j = 1,2; \quad k = \overline{1,n} \quad (5.170)$$

Якщо вектор - функція  $g(x) \in C^{(3)}(I_n^+)$ , задовольняє крайові умови

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0\right) g_1(z) \Big|_{z=l_0} = g_{10}, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \left[ \frac{d^m}{dz^m} g_{n+1}(z) \right] = 0, \quad m=0,1 \quad (5.171)$$

і умови спряження (5.171), то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора  $L_n$ :

$$\begin{aligned} & F_{+,n} \mathbb{Y}_n [g(z)]_{\mathbb{H}} - b^2 \mathbb{C}(b) - s_1 D_1 (\bar{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_1(l_0, b) \mathbb{C} g_{10} - \\ & - \mathbf{e} \int_{j=1}^n k_j^2 \int_{l_{j-1}}^{l_j} g_j(z) V_j(z, b) s_j dx - k_{n+1}^2 \int_{l_n}^{\Gamma} g_{n+1}(z) V_{n+1}(z, b) s_{n+1} dz \end{aligned} \quad (5.172)$$

**Доведення:** Оскільки функції  $g_j(z)$  та  $V_j(z, b)$  ( $j = \overline{1, n+1}$ ) задовольняють систему інтерфейсних умов (5.115), то при виконанні співвідношень (5.163) отримуємо базову тотожність:

$$\begin{aligned} & \mathbb{Y}_j \mathbb{Y}(z) V_j(z, b) - g_j(z) V_j \mathbb{Y}(z, b) \Big|_{\mathbb{H}^{\pm} = l_j} = \\ & = \frac{c_{21,j}}{c_{11,j}} \mathbb{Y}_{j+1} \mathbb{Y}(z) V_{j+1}(z, b) - g_{j+1}(z) V_{j+1} \mathbb{Y}(z, b) \Big|_{\mathbb{H}^{\pm} = l_j}; \quad j = \overline{1, n} \end{aligned} \quad (5.173)$$

Проінтегруємо в лівій частині (5.165) під знаками інтегралів два рази частинами:

$$\begin{aligned} & F_{+,n} \mathbb{Y}_n [g(z)]_{\mathbb{H}} \mathbf{e} \int_{j=1}^n D_j \int_{l_{j-1}}^{l_j} \frac{d^2 g_j(z)}{dz^2} V_j(z, b) s_j dz + D_{n+1} \int_{l_n}^{\Gamma} \frac{d^2 g_{n+1}(z)}{dz^2} V_{n+1}(z, b) s_{n+1} dz = \\ & = \mathbf{e} \int_{j=1}^n D_j s_j (g_j \mathbb{Y}(z) V_j(z, b) - g_j(z) V_j \mathbb{Y}(z, b)) \Big|_{z=l_{j-1}}^{z=l_j} + (g_{j+1} \mathbb{Y}(z) V_{j+1}(z, b) - g_{j+1}(z) V_{j+1} \mathbb{Y}(z, b)) \Big|_{z=l_n}^{\Gamma} - \\ & - \mathbf{e} \int_{j=1}^{n+1} (b^2 + k_j^2) \int_{l_{j-1}}^{l_j} g_j(x) V_j(x, b) s_j dx, \quad l_{n+1} = \Gamma \end{aligned} \quad (5.174)$$

Позаінтегральні члени в точках  $z = l_j$  ( $j = \overline{1, n}$ ) перетворюються в нуль внаслідок базової тотожності (5.173) та структури  $s_k$ , ( $k = \overline{1, n+1}$ )  
 Позаінтегральний член в точці  $x = l_0$  перетворюється до вигляду  $(\bar{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_1(l_0, b) g_{10}$ . Внаслідок умови поведінки  $g_{n+1}(z)$  при  $z \in \mathbb{R}^+$  маємо:

$$\lim_{z \in \mathbb{R}^+} (g_{n+1} \mathbb{Y}(z) V_{n+1}(z, b) - g_{n+1}(z) V_{n+1} \mathbb{Y}(z, b)) = 0.$$

Розбиваючи суму, що залишилася, на дві, приходимо до тотожності (5.172).

## Висновки

В монографії висвітлені нові підходи створення на основі паралельних обчислень високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій багато-параметричної ідентифікації складних кіберфізичних систем (нейро-біо-наномедичних та нанопористих фізичних систем) з feedback-зв'язками та взаємодіями, у тому числі і когнітивними для нейро-біосистем для визначення параметрів їх поведінки та стану окремих виконавчих елементів систем. Запропоновані високопродуктивні суперкомп'ютерні технології ідентифікації складних feedback-систем (нейро-біо- та нанопористих CPSS), в розробці яких використовуються нові наукоємні технології та обчислювальні рішення, що мають практичне застосування для розвитку соціально-економічної системи України. Перший тип розробки пов'язаний із вирішенням важливого соціального завдання - впровадження ефективних мобільних цифрових технологій неврологічного діагностування пацієнтів з вираженими ознаками тремору (у світі таких людей біля 100 мл.). Досліджувана наномедична нейро-біо-система орієнтована на визначенні параметрів аномальних рухів пацієнтів з тремор-ознаками (Т-об'єкта), спричинені негативними впливами певної множини нейронних вузлів КГР (за даними ВОЗ у світі хворобою Альцгеймера, що відноситься до критичних захворювань. Ідентифікація параметрів таких складних feedback-систем окреслить шляхи вирішення проблеми.

Другий тип розроблюваних інформаційних систем – нанопористі кіберсистеми, пов'язані з важливою екологічною проблемою світового масштабу – пошуку шляхів зниження впливу глобального потепління та реалізації європейської стратегії безпечної енергетики за рахунок кардинального зниження забруднень атмосфери шкідливими викидами вуглецевих продуктів ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{CO}$ ) об'єктів енергетики і транспорту, що потребує постійних пошуків і розробок нових наукоємних технологій поглинання (адсорбції і каталізу), основними елементами яких є нанопористі каталізатори нового покоління.



В контексті цього, основні отримані результати полягають в наступному.

1. Розроблена гібридна модель нейро feedback-системи, що описує на основі поширення хвильового сигналу стан і поведінку тремор ( $T$ )-об'єктів) - по сегментний опис 3D-елементів траєкторій АНР рухів через матриці когнітивних впливів груп нейро-вузлів КГР.

2. Побудовані нові наукоємні математичні моделі нанопористих CPSS, що враховують комплекс лімітуючих фізичних чинників та зворотних впливів і наноджерел в компетитивних наносорбційних процесах, що протікають в них.

3. Отримані високошвидкісних аналітичних розв'язків обидвох класів feedback-моделей на основі розпаралелювання обчислень та ефективних схем лінеаризації, методів гібридних інтегральних перетворень (Фур'є, Бесселя) та операційного методу Гевісайда, включаючи адаптивні матриці (відклику) визначення параметрів станів від feedback-взаємодій (груп нейро-об'єктів та наноджерел).

4. Побудовані гібридна спектральна функція АНР, системи ортогональних базових функцій та спектральних значень гібридного перетворення побудови розв'язків feedback-моделей.

5. Розроблені моделі багатопараметричної ідентифікації вказаних feedback-систем, включаючи мінімізацію функціоналів-нев'язки і побудову на їх основі явних виразів градієнтів функціоналів-нев'язки. Побудовані високопродуктивні регуляризаційні алгоритми ідентифікації, що допускають розпаралелювання обчислень з урахуванням суперкомп'ютерної архітектури обчислювальних систем.

6. Розроблене програмне забезпечення високопродуктивних суперкомп'ютерних технологій ідентифікації та засобів моделювання на основі паралельних обчислень складних feedback- систем (нейро-біо- та нанопористих систем), що є вагомим кроком у розвитку і впроваджені в Україні цифрової нейродіагностики та дієвої реалізації стратегії безпечної енергетики на основі сучасних кіберфізичних систем, наукоємних технологій і штучного інтелекту.

Результати є новими, володіють високим ступенем узагальнення, ґрунтуються на сучасних нейробіологічних та наномедичних і нанофізичних уявленнях, фундаментальних законах переносу, каталізу, когнітивних feedback-нейро-біо-взаємодіях та нанопроцесів в середовищах частинок нанопористої структури, на застосуванні високоефективних методів математичного моделювання, теорії оптимального керування станом складних систем, градієнтних методів ідентифікації параметрів, програмної інженерії.

Результати дозволяють збільшити якість і точність ідентифікації та розпізнавання зв'язків і взаємовпливів; значно оптимізувати обсяги обчислень за рахунок розпаралелювання, зменшити кількість обчислювальних елементів; забезпечити реальний час при зростанні вимог до кількості даних, розробити платформу незалежні динамічні архітектури програмного забезпечення досліджуваних feedback-систем.

## Список використаних джерел

1. Rajaraman V., Jack D., Adamovich S.V., Hening W., Sage J., Poizner H. A novel quantitative method for 3D measurement of Parkinsonian tremor. *Clinical neurophysiology*, 11(2), 187-369 (2000)
2. Haubenberger D, Kalowitz D, Nahab F B, Toro C, Ippolito D, Luckenbaugh DA, Wittevrongel L, Hallett M. Validation of Digital Spiral Analysis as Outcome Parameter for Clinical Trials in Essential Tremor. *Movement Disorders* 26 (11), 2073-2080, (2011)
3. Legrand A.P., Rivals I., Richard A., Apartis E., Roze E., Vidailhet M., Meunier S., Hainque E. New insight in spiral drawing analysis methods – Application to action tremor quantification. *J Clinical Neurophysiology*, 128 (10), 1823–1834. (2017)
4. Wang J.-S., Chuang F.-C. An Accelerometer-Based Digital Pen with a Trajectory Recognition Algorithm for Handwritten Digit and Gesture Recognition. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 59(7), 2998-3007 (2012)
5. Louis, E. D., Gillman, A., Böschung, S., Hess, C. W., Yu, Q., & Pullman, S. L. High width variability during spiral drawing: Further evidence of cerebellar dysfunction in essential tremor. *Cerebellum*, 11, 872-879 (2012).
6. Unger N., Bond T.C., Wang J.S., Koch D.M., Menon S., Shindell D.T., Bauer S. Attribution of climate forcing to economic sectors, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 107(8), 3382-7 (2010).
7. Puertolas B., Navarro M.V., Lopez J.M., Murillo R., Mastral A.M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite / *Separation and Purification Technology* 86, 127–136 (2012)
8. Michuta O., Martuniuk P., Ostapchuk O., Tsvetkova T. On non-isothermal soil water flow considering sorption effect. *Journal of Heat and Mass Transfer*, 18 (1), 181-192 (2019)
9. Ruthven D.M. *Principles of Adsorption and Adsorption Processes*, John Wiley, New York, 1984. 433 p

10. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. Diffusion in Nanoporous Materials. Hoboken, John Wiley & Sons, 2012, 660 p.
11. Langmuir I.-J. Am. Chem. Sce. 54, 2798 (1932)
12. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Методи інтегральних перетворень Фур'є-Бесселя в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. Київ: Наукова думка. - 2000. - 372 с.
13. Mykhalyk D., Mudryk I., Hoi A., Petryk M. Modern hardware and software solution for identification of abnormal neurological movements of patients with essential tremor. IEEE. Proceeding of 2019 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT, Budejovice, Czech Republic), 183-186 (2019)
14. Петрик М.Р., Михалик Д.М., Мудрик І.Я. Спосіб цифрового вимірювання параметрів аномальних неврологічних рухів верхніх кінцівок у пацієнтів із проявами тремору. Патент на корисну модель №130247, Бюл. №22 від 26.11.2018
15. Lecler S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Using Proton NMR and Sclice Selection Procedure. Catalysis Today, Elsevier B.V., 187(1), 104-107 (2012)
16. Petryk M., Leclerc S., D. Canet, Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. The Competitive Diffusion of Gases in a zeolite bed: NMR and Slice Procedure, Modelling and Identification of Parameters. The Journal of Physical Chemistry C. ACS, 119 (47), 26519-26525 (2015).
17. Petryk M.R., Khimich O.M., Boyko I.V, Mykhalyk D.M., Petryk M.M., Kovbashyn V.I. Mathematical modeling of heat transfer and adsorption of hydrocarbons in nanoporous media of exhaust gas neutralization systems. National Academy of Sciences of Ukraine. Kyiv, 2018, 280 p.
18. Petryk M., Khimitch A., Petryk M.M.. Simulation of Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Catalysts of Neutralization Systems of Exhaust Gases Using Nonlinear Langmuir Isotherm. Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, 50 (10), 18-33 (2018)

19. Petryk M., Khimitch A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. *Fuel*. Vol. 239, 1324–1330 (2019)
20. Сергієнко І.В., Петрик М.Р., Леклерк С., Фресар Ж. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури. — К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова. — 2014. — 210 с.
21. I.V. Sergienko, V.S. Deineka, *Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions*, New York: Kluwer Academic Publishers 2005.
22. A.N. Tikhonov, V.Y. Arsenin. *Solutions of Ill-Posed Problems*, Washington D.C.: V.H. Winston; New York: J. Wiley 1977.
23. J.-L. Lions, *Perturbations Singulières dans les Problèmes aux Limites et en Contrôle Optimal*, New York: Springer. Lecture Notes in Math. Ser. 2008.
24. Sergienko. I.V., Petryk M.R, Leclerc S., Fraissard J. Highly Efficient Methods of the Identification of Competitive Diffusion Parameters in Inhomogeneous Media of Nanoporous Particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. Springer, 51(4), 529-546 (2015).
25. Ivanchov M. *Inverse Problems for Equations of Parabolic Type*. Mathematical Studies. Monograph Series. Vol. 10, Lviv: VNTL Publishers 2003.
26. Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Competitive Adsorption and Diffusion of Gases in a Microporous Solid. In the book "Zeolites – New Challenges". IntechOpen London, UK. P.1-23. (2019) <https://www.intechopen.com/online-first/competitive-adsorption-and-diffusion-of-gases-in-a-microporous-solid>
27. Landau L. To the theory of phase transitions. *I.ZPhys. Ztshr Sow*, 1937, Bd. 7. S. 19.
28. Prudnikov A.P., Brichkov Yu.A. Marychev O.I. *Integrals and series. Additional chapters*, Nauka, Moscow, 1986, 800 p.
29. Lavrentiev M.A., Shabat B.V. *Methods of theory of functions of a complex variable*. M.: Nauka, 1973, 736 p.

30. Petryk M., Khimich A., Mykhalyk M., Boyko I., Kovbachun V. High-performance computing technologies of modeling and identification of adsorption in nanoporous systems with feedbacks for gas purification. *Vistyky of TNTU*. Vol. 3, 139-145 (2019)
31. Петрик М.Р., Хіміч О.М., Бойко І.В., Петрик О.Ю. Високопродуктивні обчислювальні методи і технології моделювання нанопористих систем зі зворотніми зв'язками для адсорбційного очищення газів // Вісник національного ун-ту водного госп-ва та природокористування. Серія: Технічні науки. Вип. 3(87), 2019. С. 66-83
32. Інформаційний веб-сайт Top500 The List // Доступ ресурсу: <http://www.top500.org>
33. Городецкий А.С., Евзеров И.Д. Компьютерные модели конструкций. - К.: ФАКТ. – 2007. – 394 с.
34. Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф. Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики. - Київ, Наукова думка. -2008. - 248 с.
35. Нестеренко А.Н., Химич А.Н., Яковлев М.Ф. Некоторые вопросы решения систем нелинейных уравнений на многопроцессорных вычислительных системах с распределенной памятью. // Вестник компьютерных и информационных технологий, М.: 2006. - № 10. - С. 54 – 56.
36. Нестеренко А.Н., Попов О.В., Рудич О.В. Розв'язування систем нелінійних рівнянь на комп'ютерах з паралельною організацією обчислень // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки. Зб. наук. праць 2019, вип. 19. С. 85–91
37. E.A. Velikoivanenko, A.S. Milenin, A.V. Popov, V.A. Sidoruk, A.N. Khimich. Methods of Numerical Forecasting of Serviceability of Welded Structures on Computers of Hybrid Architecture // *Cybernetics and Systems Analysis*, Vol. 53, No. 1, January, 2019. – P. 117-127
38. Химич А.Н., Попов А.В., Чистяков А.В. Гибридные алгоритмы решения алгебраической проблемы собственных значений с разреженными

- матрицами. // Кибернетика и системный анализ. – 2017. – Том 53, № 6. – С. 132 – 146.
39. Джордж А., Лю Дж. Численное решение больших разреженных систем уравнений. – М.: Мир, 1984. – 334 с.
40. <http://software.intel.com/en-us/intel-mkl>. [Электронный ресурс]
41. [http://developer.download.nvidia.com/CUBLAS\\_Library.pdf](http://developer.download.nvidia.com/CUBLAS_Library.pdf). . [Электронный ресурс] CUBLAS Linear Algebra
42. Попов А.В. Параллельные алгоритмы решения линейных систем с разреженными симметричными матрицами. // Проблеми програмування, №2-3, 2008 р. Спец. випуск. Матеріали шостої міжнародної науково-практичної конф. з програмування УкрПРОГ'2008. – С.111-118.
43. Химич А.Н., Попов А.В., Полянко В.В. Алгоритмы параллельных вычислений для задач линейной алгебры с матрицами нерегулярной структуры // Кибернетика и системный анализ. – 2011. – № 6. – С. 159-174.
44. Хіміч О.М., Попов О.В., Полянко В.В. Проблеми паралельних і розподілених обчислень при дослідженні математичних моделей з розрідженими структурами даних // Праці Міжнародної наукової конференції “Питання оптимізації обчислень (ПОО–XL)”. – Київ: Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, 2013. – С. 267-268.
45. Хіміч О.М., Баранов А.Ю. Гібридний алгоритм розв’язування лінійних систем зі стрічковими матрицями прямими методами // Комп’ютерна математика. – 2013, Вип. 2. – С. 80-87.
46. Попов О.В. Про паралельні алгоритми факторизації розріджених матриць // Комп’ютерна математика. – 2013, Вип. 2.– С. 115-124.
47. Великоиваненко Е.А., Миленин А.С., Попов А.В. Сидорук В.А.,Химич А.Н. Методы и технологии параллельных вычислений для мате-матического моделирования напряженно-деформированного состояния конструкций с учетом вязкого разрушения // Проблемы управления и информатики, №6, 2014 г. – С. 42-52.

48. Баранов А.Ю. Гібридний алгоритм факторизації стрічкових несиметричних матриць. // Теорія оптимальних рішень, – 2015 – С. 22-28.
49. Хіміч О.М., Сидорук В.А. Плитковий алгоритм факторизації розрідженої матриці // Комп'ютерна математика. – 2015. – Вип. 2. – С. 109-116.
50. Попов О.В., Рудич О.В. Дослідження паралельного алгоритму розв'язування лінійних систем із стрірковою несиметричною матрицею // Матеріали Всеукраїнської науково-практичної конференції за міжнародною участю "Інформатика та системні науки (ІСН-2015)", м. Полтава, 19–21 березня 2015 р.
51. Баранов А.Ю., Слободян Я.Е., Попов А.В., Химич А.Н. Математическое моделирование прочности строительных конструкций на гибридных вычислительных системах // Международный научно-технический журнал «Проблемы управления и информатики». – 2017. – № 4.– С. 68 – 81.
52. Попов О.В., Рудич О.В. До розв'язування систем лінійних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки. Зб. наук. праць. – 2017. – Вип. 15. – С. 158-164.
53. Уилкинсон Дж. Х., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра. - М.: Машиностроение, 1976. - 389 с.
54. Попов А.В., Химич А.Н. Параллельный алгоритм решения системы линейных алгебраических уравнений с ленточной симметричной матрицей // Компьютерная математика. - 2005. - № 2. - С. 52-59.
55. Хіміч О.М., Сидорук В.А. Дрібно-плитковий гібридний алгоритм факторизації розрідженої матриці // Матеріали VII Всеукраїнської науково-практичної конференції за міжнародною участю «Інформатика та системні науки (ІСН – 2016)» – Полтава, 2016. – С. 326-328.
56. Хіміч О.М., Сидорук В.А. Плитковий гібридний алгоритм факторизації розріджених блочно-діагональних матриць з обрамленням // Комп'ютерна математика. – 2016. – Вип. 1. – С. 72-79.



57. Хіміч О.М., Сидорук В.А. Плитковий гібридний алгоритм факторизації структурно-симетричних матриць // Теорія оптимальних рішень, – 2017. – С. 125-132.
58. Buttari A., Langou J., Kurzak J., Dongarra J. A Class of Parallel Tiled Linear Algebra Algorithms for Multicore Architectures. *Parallel Computing*. – 2009. Vol. 35, Issue 1. – P. 8–53.
59. Суперкомп'ютерний комплекс СКІТ [Електронний ресурс], режим доступу: <http://icybcluster.org.ua/>
60. Боресков А.В., Харламов А.А. – Основы работы с технологией CUDA. М.: Пресс. – 2010. – 232 с.
61. cuSparse Library. URL: <http://docs.nvidia.com/cuda/cuSPARSE/>
62. Mykhalyk D., Petryk M., Petryk M., Petryk O., Mudryk I., Mathematical Modeling of Hydrocarbons Adsorption in Nanoporous Catalyst Media using Nonlinear Langmuir's Isotherm using Activation Energy. *IEEE. Proceeding of 2019 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT, Budejovice, Czech Republic), 72 -75 (2019)*

**ХІМІЧ О.М.  
ПЕТРИК М. Р.  
МИХАЛИК Д. М.  
БОЙКО І.В.  
ПОПОВ О.В.  
СИДОРУК В.А,**

**МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ  
СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ НА ОСНОВІ  
ВИСОКОПРОДУКТИВНИХ ОБЧИСЛЕНЬ**

(нейро- та нанопористі кіберфізичні системи із зворотніми зв'язками, моделі з даними розрідженої структури, паралельні обчислення)

Київ: Національна академія наук України  
Інститут кібернетики ім. В. Глушкова

Комп'ютерна верстка: Мудрик І.Я.

**ISBN 978-966-02-9188-1**

Видавництво Національної академії наук України  
01601, МСП, Київ-30, Володимирська, 54  
тел. (044) 239-65-89,  
[www.publications.nas.gov.ua](http://www.publications.nas.gov.ua)

Підписано до друку « 29.12.2019 Формат 60×84, 1/16.  
Друк лазерний. Папір офсетний. Гранітура Times New Roman.  
Умовно-друк. арк. 4,0. Наклад – 350 прим.  
Замовлення №4-1213.

Друк ПП Паляниця В.А.  
Свідоцтво про реєстрацію № 924385 від 18.08.2008 р.  
м. Тернопіль, просп. С. Бандери 15.  
тел. (0352) 52-52-50.