

2. Абрикосов Н.Х., Банкина В.Ф. Исследование свойств сплавов в процессе распада твердого раствора GeTe-PbTe/ Неорганические материалы. – 1981. – Т.17. – №3. – С. 545-546.
3. Леонов Б.В. Электрические свойства сплавов $GexPb1-xTe$ и $GexSn1-xTe$. Неорганические материалы. – 1984. – Т.20. – №4. – С.683.
4. Абрикосов Н.Х., Банкина В.Ф., Коломоец Л.А., Арутюнова Л.Л. Исследование свойств твердых растворов на основе халькогенидов висмута и сурьмы в процессе образования упорядоченных структур// Неорганические материалы. – 1979. – Т.15. – №3. – С. 400-402.
5. Лисняк С.С. Кристаллоквазимимическая модель исследований и химии твердого тела. Неорганические материалы. – 1992. – Т.29. – №9. – С.1913-1917.

Я.П.Салій

ПОБУДОВА ДОВІРЧОЇ ОБЛАСТІ НЕЛІНІЙНОЇ ЗА ПАРАМЕТРАМИ ЗАЛЕЖНОСТІ

Запропоновано і реалізовано на комп'ютері алгоритм розрахунку довірчої області для довільної апроксимуючої експериментальні дані нелінійної за параметрами функції.

Границя довірчої області розраховується для сукупності рівномірно розташованих абсцис. В кожній абсцисі для деякої послідовності ординат здійснюється перевірка належності довірчій області кожної точки кривої, близької до оптимальної. Ординати задаються з рівномірним кроком, який визначає точність знаходження границь. Перша ордината вибирається на оптимальній кривій. Зміст перевірки полягає в тому, щоб визначити, чи існує така крива, що проходить через задану точку (x, y) , сума квадратів нев'язок для якої S' менша S – суми квадратів нев'язок кривих, дотичних до границь довірчої області. Очевидно, що через задану точку можна провести нескінченне число кривих, однак з цієї множини необхідно вибрати таку послідовність, для якої послідовність сум квадратів нев'язок S'_n сходилась би до деякої $S'_{\min}(x, y)$. Якщо для деякого значення елемента послідовності S'_n виявиться, що воно менше S , то це означає, що точка, яка перевіряється, лежить всередині області, і далі здійснюється перевірка наступної ординати. Так діємо, поки для деякої ординати не виявиться, що досягнуто S'_{\min} і воно більше S . Цю ординату з точністю до кроку будемо вважати ординатою точки, що відповідає границі довірчої області. Виконавши розрахунок за цим алгоритмом для всього ряду абсцис, одержимо граничні точки довірчої області. Таким чином, алгоритм розрахунку довірчої області зведено до побудови монотонно спадної послідовності S'_n .

Опишемо на прикладі трьохпараметричної експоненційної залежності реалізований у програмі Region алгоритм побудови послідовності S'_n для деякої точки (x, y) .

Виходячи з того, що через задану точку має проходити шукана експонента

$$y = a + b e^{cx}, \quad (1)$$

визначимо один з її параметрів, наприклад, a через координати цієї точки

$$a = \bar{y} - b e^{c \bar{x}}. \quad (2)$$

Використовуючи цей вираз для a , розрахуємо суму квадратів нев'язок S' для експоненти, що проходить через точку (x, y) :

$$S' = \sum \{y_i - \bar{y} - b(e^{c x_i} - e^{c \bar{x}})\}^2. \quad (3)$$

Виходячи з цього виразу, легко утворити необхідну послідовність S'_n , якщо здійснити деяким способом мінімізацію $S'(b,c)$ за аргументами b і c .

Необхідною умовою мінімуму є рівність нулю похідних за аргументами. Запишемо одержану систему рівнянь:

$$\partial S' / \partial b = -2 \sum \{y_i - \bar{y} - b(e^{c x_i} - e^{c \bar{x}})\} (e^{c x_i} - e^{c \bar{x}}) = 0, \quad (4)$$

$$\partial S' / \partial c = -2 \sum \{y_i - \bar{y} - b(e^{c x_i} - e^{c \bar{x}})\} b(x_i e^{c x_i} - \bar{x} e^{c \bar{x}}) = 0. \quad (5)$$

Ці компоненти аргумента використано у пошуку S_{\min} методом градієнтного спуску. Для зменшення числа аргументів i , відповідно, збільшення швидкості спуску будемо рахувати перше рівняння зв'язком на аргументи. У це рівняння b входить лінійно.

Таблиця

Параметри оптимальних апроксимуючих залежностей концентрації носіїв заряду та їх мінімальні та максимальні допустимі межі для 90% довірчої області, а також параметри деяких допустимих залежностей, близьких за величинами параметрів

| | $n(T_{11}), 10^{18} \text{ см}^{-3}$ | $n(T_{Se}), 10^{18} \text{ см}^{-3}$ $T_n=540\text{K}$ | $n(T_{Se}), 10^{18} \text{ см}^{-3}$ $T_n=580\text{K}$ |
|-----------------------------------|--------------------------------------|---|---|
| $a, 10^{18} \text{ см}^{-3}$ | 1.87<3.24<8.22 | 0.43<1.29<1.95 | 0.008<0.307<1.96 |
| $\ln(b), 10^{18} \text{ см}^{-3}$ | 3.22<4.38<7.18 | 2.11<4.55<5.80 | 1.93<3.25<4.86 |
| $c, \text{кК}$ | -3.74<-1.79<-0.62 | -2.48<-1.67<-0.62 | -1.71<-1.06<-0.36 |
| параметри допустимих залежностей | | | |
| $a, 10^{18} \text{ см}^{-3}$ | 2.0 | 0.9 | 0.6 |
| $\ln(b), 10^{18} \text{ см}^{-3}$ | 7.2 | 3.8 | 4.0 |
| $c, \text{кК}$ | -3.7 | -1.5 | -1.3 |

Виразивши з нього b через c і підставивши в (3) і (5), одержимо функцію $S'(c)$ і градієнт від неї, що залежать тільки від одного аргумента. Для переходу до нового значення аргумента c віднімаємо від попереднього значення величину, пропорційну градієнту. Умовою досягнення S_{\min} вважаємо виконання нерівності: модуль градієнта S' менший 10^{-4} .

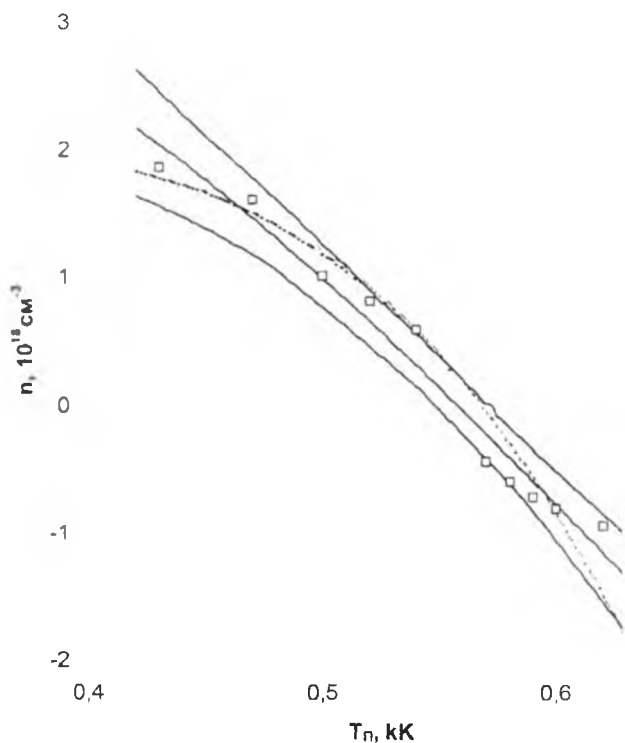


Рис. 1 Довірча область, оптимальна та допустима апроксимуючі криві для експериментальної залежності концентрації носіїв заряду півок PbSe на BaF2 при 77K від температури осадження ТП.

Таким чином, в цьому методі розрахунку довірчої області для трьохпараметричної експоненти здійснюється мінімізація функції одного аргумента. Час розрахунку на РС - 486 займає біля хвилини в залежності від кількості експериментальних точок (≤ 40) і точок, в яких розраховується границя довірчої області (≤ 50).

Значення S для критичної області визначається за формулою

$$S = S_{\text{опт}} (1 - p F_{p, n-p, \alpha} / (n-p)).$$

де $S_{\text{опт}}$ — сума квадратів нев'язок для оптимальної кривої, p — число параметрів, n — число експериментальних точок, $F_{p, n-p, \alpha}$ — граничне значення α 100% довірчого рівня розподілу Фішера [1].

Роботу методу продемонструємо на прикладі обробки експериментальних результатів, опублікованих в [2].

Експериментальні точки, розраховані оптимальні та по одній з допустимих апроксимуючих кривих, а також границі довірчих областей ця прийнятого 10% рівня значимості представлено на рис.1 і 2. Параметри кривих представлено в таблиці.

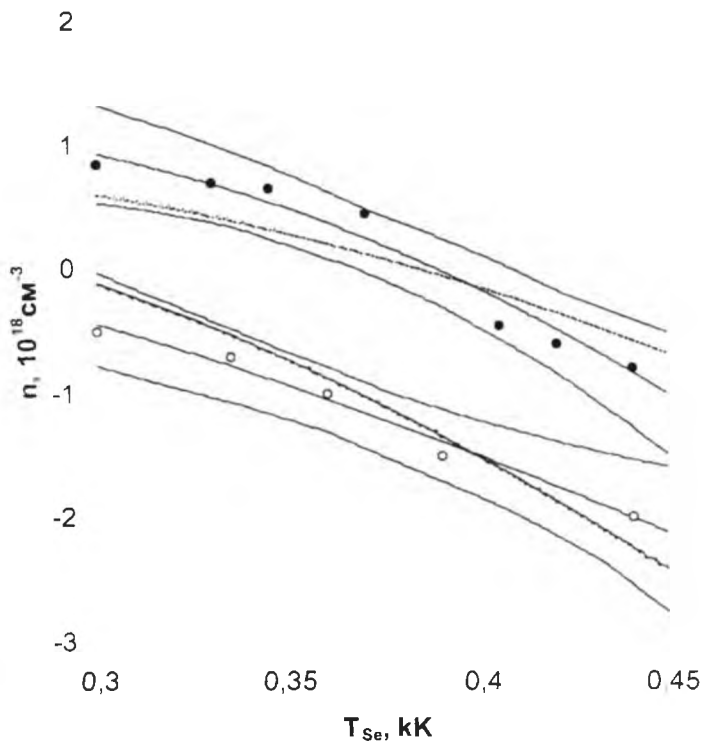


Рис. 2. Довірчі області, оптимальні та допустимі апроксимуючі криві для експериментальних залежностей концентрації носіїв заряду плівок PbSe на BaF2 при 77K від температури додаткового джерела селену T_{Se} . Верхні залежності для температури підкладки 540, нижні для 580K.

A new method of the calculation of confidence region for non-linear approximating function by the parameters was proposed and realized.

Худсон Д. Статистика для фізиків. – М.: Мир, 1970. – 296с.

Фреик Д.М. и др. Особенности получения слоев PbSe методом горячей стенки
Электронная техника – 1982. – Т.2 – С.48 – 51.

Возняк О.М., Возняк Н.О.

ПОБУДОВА ЗАМКНУТИХ ШЛЯХІВ БЕЗ САМОПЕРЕТИНІВ НА КВАДРАТНІЙ ГРАТЦІ, ПІДРАХУНОК ЇХ КІЛЬКОСТІ ТА ОХОПЛЕНИХ НИМИ ПЛОЩ

Використовуючи комп'ютерні методи, побудовано замкнуті шляхи без самоперетинів на квадратній ґратці для 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18 і 20 кроків. Обчислено максимальну кількість діаграм із заданою довжиною периметра та їх площі

Оскільки точний розв'язок прикладних задач вдається знайти лише для обмеженої кількості і притому лише дуже ідеалізованих моделей, то розв'язання більшості задач здійснюється, в основному, різними наближеними методами, і, зокрема, розкладом у ряди за одним із малих параметрів системи. В цьому випадку, оскільки ряд збіжний, суму ряду можна із заданою точністю замінити сумою більшої чи меншої кількості його перших доданків. Дуже часто кожному члену ряду зручно співставити деякий "граф", або, як кажуть частіше, діаграму. Широко відомі діаграми групових розкладів класичної статистичної фізики [1], чи діаграми Фейнмана квантової теорії полів [2]. Представлення коефіцієнтів ряду у вигляді комбінаторних множників для ґраткових діаграм тепер широко використовується також в теорії фазових переходів [3], теорії неупорядкованих систем [4] та інших галузях теоретичної фізики. При цьому дуже часто ненульовий вклад вносять лише такі доданки, які містять певну величину парну кількість разів. Ця умова приводить до того, що можливі конфігурації зв'язків зображаються многокутниками без самоперетинів.

Така ситуація має місце і при розгляді проблеми андерсонівської локалізації, яка найчастіше вивчається на моделі сильного зв'язку з тімільтоніаном Андерсона [4]

$$H = \sum_i E_i a_i^+ a_i + \sum_{ij} V_{ij} a_i^+ a_j, \quad (1)$$

де a_i^+ (a_i) – оператор породження (знищення) електрона на i -му вузлі,