

УДК 530.1:51-72, 517.958:52/59, 621;539;51-7

№ держреєстрації 0121U109982

Інв. № \_\_\_\_\_

Міністерство освіти і науки України  
Таврійський державний агротехнологічний університет  
імені Дмитра Моторного  
72312, Запорізька область, м. Мелітополь, проспект Богдана Хмельницького, 18.  
тел./факс (0619)-42-24-11



ЗАТВЕРДЖУЮ

Проректор з наукової роботи  
д.т.н., професор

Анатолій ПАНЧЕНКО

підпис

22 12  
дата

2025 р.  
М. П.

ЗВІТ  
ПРО НАУКОВО-ДОСЛІДНУ РОБОТУ  
(заключний)

**«МОДЕЛЮВАННЯ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ОРГАНІЗАЦІЙНО-  
ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ»**

Директор НДІ  
д.ф.-м. н., проф.

підпис

22 12  
дата

Валерій КІДАЛОВ

2025 р.

2025

Результати роботи розглянуто НТР НДІ,  
протокол від «22» 12 2025 р. № 4

## СПИСОК АВТОРІВ

Директор НДІ «Нанотехнологій і наноматеріалів», професор кафедри «Вища математика і фізика»,

д-р фіз.-мат. наук, професор

Виконавці:

Завідувачка кафедри «Вища математика і фізика», канд. техн. наук, доцент



підпис

22.12.2025

дата

Валерій КІДАЛОВ  
(реферат; вступ;  
розділ 1, 2; висновки)



підпис

22.12.2025

дата

Наталя ДЬОМІНА  
(вступ; розділ 2, 3;  
висновки)

доцент кафедри «Вища математика і фізика», канд. техн. наук, доцент



підпис

22.12.2025

дата

Микола ДАНЧЕНКО  
(розділ 3; висновки)

доцент кафедри «Вища математика і фізика», канд. фіз.-мат. наук, доцент



підпис

22.12.2025

дата

Василь КРАВЕЦЬ  
(розділ 3, 4;  
висновки)

доцент кафедри «Вища математика і фізика», канд. техн. наук



підпис

22.12.2025

дата

Альона ДЯДЕНЧУК  
(вступ; розділ 1, 2;  
висновки)

старший викладач кафедри «Вища математика і фізика»



підпис

22.12.2025

дата

Дмитро ОДНОВОЛ  
(розділ 4; висновки)

## РЕФЕРАТ

Звіт до НДР: 89 с., 1 ч., 9 табл., 33 рис., 145 джерел.

Математичне моделювання, комп'ютерне моделювання, квантові точки, фотоелектричні перетворювачі, багаточастотні системи, контактна механіка, фенольні сполуки.

**Об'єкт дослідження** – організаційно-технологічні процеси та системи.

**Мета роботи** – розробка й теоретичне обґрунтування моделей організаційно-технологічних процесів та систем.

**Предмет дослідження** – моделі організаційно-технологічних процесів та систем.

У звіті узагальнено результати п'ятирічних досліджень, що охоплюють моделювання квантових точок, оптимізацію фотоелектричних перетворювачів на основі низькорозмірних гетероструктур, аналіз багаточастотних систем із запізненнями, моделювання контактної взаємодії поверхонь та вивчення біологічно активних фенольних сполук.

Встановлено закономірності впливу параметрів оболонки на енергетичні рівні та хвильові функції електронів у циліндричних квантових точках, що дозволило уточнити моделі фінітного руху електрона.

Доведено ефективність використання поруватого кремнію та оксидних плівок у гетероструктурних фотоелектричних перетворювачах для підвищення їх енергоефективності.

Вперше отримано параметричні залежності напружено-деформованого стану контактуючих поверхонь із урахуванням податливості поверхневих шарів.

Отримані результати мають теоретичне та прикладне значення для енергетики, матеріалознавства, машинобудування та біотехнологій.

## ЗМІСТ

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ.....	5
ВСТУП .....	6
РОЗДІЛ I. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНІВ У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ З ОБОЛОНКОЮ .....	7
Висновки до першого розділу.....	12
РОЗДІЛ II. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ .....	14
2.1. Комп'ютерне моделювання функціональних характеристик фотоелектричних перетворювачів на основі низькорозмірних напівпровідникових гетероструктур.....	14
2.2. Моделювання характеристик сонячних елементів на основі поруватого кремнію.....	17
2.3. Моделювання фотоелектричних характеристик гетероперехідного сонячного елемента ZnO/porous-Si/Si.....	25
2.4. Моделювання та оптимізація сонячних елементів CdS/CdTe з одношаровими антивідбивними покриттями .....	35
Висновки до другого розділу .....	38
РОЗДІЛ III. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ .....	40
3.1. Когнітивне моделювання управління туризмом.....	40
3.2. Багаточастотні системи із запізненнями.....	50
3.3. Контактна механіка поверхонь .....	58
Висновки до третього розділу.....	62
РОЗДІЛ IV. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ЗА ДОПОМОГОЮ СТРУКТУРОВАНИХ ДИСКРЕТНИХ МОДЕЛЕЙ .....	63
Висновки до четвертого розділу.....	72
ВИСНОВКИ.....	73
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	74

## ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

СЕ – сонячний елемент

ФЕП – фотоелектричний перетворювач

ВАХ – вольт-амперна характеристика

ГП – гетероперехід

PS – поруватий кремній

$V_{oc}$  – напруга холостого ходу

$J_{sc}$  – струм короткого замикання

FF – фактор заповнення

$\eta$  – ефективність перетворення

КТ – квантова точка

ЦКТ – циліндрична квантова точка

$\psi$  – хвильова функція

$\rho$  – щільність ймовірності

SEM – скануючий електронний мікроскоп

EDAX – енергодисперсійний аналіз

CPE – фрактальна ємність

AVN – авенантраміди

DFG – диферуїлгліцерол

ZnO, TiO<sub>2</sub>, CdS, CdTe, Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> – матеріали гетероструктур

## ВСТУП

Сучасні наукові дослідження вимагають комплексного підходу до моделювання процесів і систем, що охоплюють фізичні, технологічні, інженерні та біологічні аспекти. Математичне та комп'ютерне моделювання є ключовими інструментами для аналізу складних об'єктів, оптимізації їх параметрів та прогнозування поведінки в різних умовах. Актуальність теми зумовлена необхідністю підвищення ефективності енергетичних систем, удосконалення технологічних процесів, розвитку нових матеріалів і розширення можливостей міждисциплінарних досліджень.

**Метою роботи** є розробка й теоретичне обґрунтування моделей організаційно-технологічних процесів та систем.

**Об'єктом досліджень** є організаційно-технологічні процеси та системи.

**Предмет дослідження** – моделі організаційно-технологічних процесів та систем.

**Методи досліджень:** поставлені завдання вирішувалися з застосуванням апарату сучасної математичної фізики, чисельного та комп'ютерного моделювання.

**Наукова новизна одержаних результатів** полягає у встановленні закономірностей поведінки електронів у квантових точках, оптимізації характеристик гетероструктурних фотоелектричних перетворювачів, розвитку методів моделювання багаточастотних систем із запізненнями, уточненні моделей контактної взаємодії поверхонь та виявленні особливостей біосинтезу фенольних сполук у рослинній сировині.

**Практичне значення одержаних результатів** полягає у можливості застосування розроблених моделей для оптимізації конструкцій сонячних елементів, підвищення надійності інженерних систем, удосконалення технологічних процесів.

## РОЗДІЛ I. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТАНУ ЕЛЕКТРОНІВ У КВАНТОВІЙ ТОЧЦІ З ОБОЛОНКОЮ

**Постановка проблеми.** В елементній базі сучасних інформаційних технологій (монітори, лазери, сенсори) використовують квантові точки, які мають граничні малі розміри [1]. Тому розробка теоретичних моделей різноманітних квантових точок (сферичних, циліндричних, конічних), які дозволяють дослідити спектр енергетичних рівнів, є актуальною задачею. Крім того, розгляд впливу параметрів оболонки на фінітний рух електрона у ЦКТ представляє певний інтерес та забезпечує розгляд хвильових функцій та щільності ймовірності стану електрона. Для уточнення обчислення власної енергії електрона застосовано дискретні моделі розв'язку рівняння Шредінгера.

**Аналіз останніх досліджень і публікацій.** Стан носіїв електричного заряду (електронів) та власні значення енергії визначаються геометричною формою, розмірами, речовиною квантової точки (КТ) (ефективна маса електрона) та параметрами оболонки. У статтях [2-4] розглянуто вплив параметрів модифікованого потенціалу Пешля-Теллера на стан електрона та власні значення енергії у ЦКТ. У роботі [5] показано, що спектр енергетичних рівнів сильно сплющеної еліпсоїдальної квантової точки може бути наближено відтворений за допомогою моделі циліндричної квантової точки, що забезпечує коректний опис основних електронних станів. Сферичні квантові точки без оболонки та з оболонкою розглянуто у працях [6-8]. Для S-електронів, коли орбітальний момент відсутній, отримано власні значення енергії та щільність ймовірності стану. Аналітичні дослідження стану електронів у пірамідальних та конічних квантових точках із застосуванням представлення рівняння Шредінгера у модифікованій циліндричній системі координат наведено в статті [9]. Розгляд конічних квантових точок та залежності енергії електрона від параметрів КТ (радіуса основи і висоти)

представлені у роботах [1010-12]. Дискретні моделі розв'язку диференціальних рівнянь в частинних похідних розглядаються, наприклад, в роботі [13].

**Мета дослідження** – розробити модель циліндричної квантової точки з оболонкою. Знайти розв'язок рівняння Шредінгера для стаціонарних станів  $S$ -електронів, застосовуючи в тому числі дискретні моделі, знайти власні значення енергії електрона та щільність ймовірності знаходження електрона у заданій області простору. Дослідити залежність енергії електрона від параметрів квантової точки та оболонки

Розглянемо найпростішу модель циліндричної квантової точки радіуса  $R$  та висоти  $H$  з оболонкою товщиною  $d$  (рис. 1.1, а). Речовина ядра (core) ЦКТ напівпровідник  $n$ -типу, оболонки (shell) – напівпровідник  $p$ -типу. Використовуємо циліндричну систему координат. Тоді у першому наближенні потенціальна енергія (модель обмежуючого потенціалу) має вигляд (рис. 1.1, б):

$$U(r, z) = \begin{cases} 0 & \text{у ядрі, якщо } 0 \leq r \leq R \text{ та } -\frac{H}{2} \leq |z| \leq \frac{H}{2} \\ U_0 & \text{у оболонці, якщо } R < r \leq R + d \text{ та } \frac{H}{2} \leq |z| \leq \frac{H}{2} + d \end{cases} \quad (1.1)$$

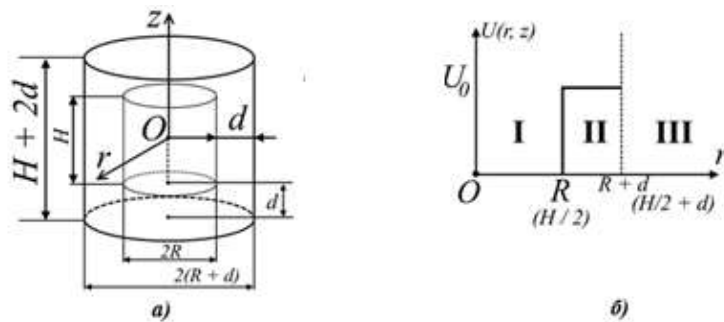


Рис. 1.1. а) – циліндрична квантова точка з оболонкою:

$R$  – радіус,  $H$  – висота,  $d$  - товщина оболонки; б) – потенціальна енергія електрона:  $U_0$  – висота потенціальної ями.

Стаціонарне рівняння Шредінгера для хвильової функції  $\psi_1(r, z)$   $S$ -електронів (орбітальний момент  $l=0$ ) у наближенні ефективної маси для ядра (область I) має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi_1}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial z^2} + k_1^2 \cdot \psi_1(r, z) = 0, \quad (1.2)$$

де хвильове число

$$k_1 = \frac{\sqrt{2m_1 E}}{\hbar} \quad (1.3)$$

Розв'язок диференціального рівняння (1.2) знаходимо, використовуючи метод Фур'є розділення змінних:

$$\psi_1(r, z) = A \cdot \varphi_1(r) \cdot \varphi_2(z) = A \cdot J_0(k_3 \cdot r) \cdot \cos(k_4 \cdot z), \quad (1.4)$$

де  $J_0(k_3 \cdot r)$  – функція Бесселя нульового порядку.

Для оболонки (область II) рівняння Шредінгера має вигляд:

$$\frac{\partial^2 \psi_2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \psi_2}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial z^2} - k_2^2 \cdot \psi_2(r, z) = 0, \quad (1.5)$$

де хвильове число

$$k_2 = \frac{\sqrt{2m_1(U_0 - E)}}{\hbar} \quad (1.6)$$

Диференціальне рівняння (1.5) є модифікованим рівнянням Бесселя та має наступний розв'язок:

$$\psi_2(r, z) = B \cdot \varphi_3(r) \cdot \varphi_4(z) = B \cdot K_0(k_5 \cdot r) \cdot e^{-k_6 \cdot z}, \quad (1.7)$$

де  $K_0(k_5 \cdot r)$  – функція Макдональда (модифікована функція Бесселя другого роду від уявного аргументу).

Використовуючи рівняння Шредінгера (1.2), отримуємо:

$$k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = k_3^2 + k_4^2 \quad (1.8)$$

З рівняння (1.5):

$$k_2^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} = k_5^2 + k_6^2 \quad (1.9)$$

Тоді

$$k_3^2 + k_4^2 + k_5^2 + k_6^2 = \frac{2mU_0}{\hbar^2} \quad (1.10)$$

Визначасмо власні значення енергії  $E_{n,m}$  та хвильові числа  $k_3$ ,  $k_4$ ,  $k_5$  та  $k_6$ . Хвильова функція  $\psi(r, z)$  повинна бути неперервною та гладкою. Використовуємо граничні умови при  $r=R$ :

$$\begin{aligned} \psi_1(R, z) &= \psi_2(R, z), \\ \varphi_1(R) &= A \cdot J_0(k_3 \cdot R) = \varphi_3(R) = B \cdot K_0(k_5 \cdot R), \end{aligned}$$

звідки

$$B = A \frac{J_0(k_3 \cdot R)}{K_0(k_5 \cdot R)}, \quad (1.11)$$

$$\varphi'_1(R) = -A \cdot k_3 \cdot J_1(k_3 \cdot R) = \varphi'_3(R) = -B \cdot k_5 \cdot K_1(k_5 \cdot R),$$

тоді:

$$\frac{k_3}{k_5} = \frac{J_0(k_3 \cdot R) \cdot K_1(k_5 \cdot R)}{K_0(k_5 \cdot R) \cdot J_1(k_3 \cdot R)} \quad (1.12)$$

При  $z = \frac{H}{2}$ :

$$\psi_1\left(r, \frac{H}{2}\right) = \psi_2\left(r, \frac{H}{2}\right),$$

$$\varphi_2\left(\frac{H}{2}\right) = \cos\left(k_4 \cdot \frac{H}{2}\right) = \varphi_4\left(\frac{H}{2}\right) = e^{-k_6 \cdot \frac{H}{2}},$$

тоді:

$$\cos\left(k_4 \cdot \frac{H}{2}\right) = e^{-k_6 \cdot \frac{H}{2}}, \quad (1.13)$$

$$\varphi'_2\left(\frac{H}{2}\right) = -k_4 \cdot \sin\left(k_4 \cdot \frac{H}{2}\right) = \varphi'_4\left(\frac{H}{2}\right) = -k_6 \cdot e^{-k_6 \cdot \frac{H}{2}}.$$

тоді:

$$k_4 \cdot \sin\left(k_4 \cdot \frac{H}{2}\right) = k_6 \cdot e^{-k_6 \cdot \frac{H}{2}}. \quad (1.14)$$

Систему рівнянь (1.10), (1.12), (1.13), (1.14) вирішуємо чисельним методом послідовних наближень (ітерацій) та визначаємо хвильові числа.

Наприклад, при ефективній масі електрона

$$m=0,067m_0 \text{ (GaAs); } U_0=1,2\text{eV} \gg E_{n,m}; R=6 \cdot 10^{-9}\text{м},$$

$$H=1,2 \cdot 10^{-8}\text{м}, d=3 \cdot 10^{-9}\text{м та } n=m=1$$

отримаємо:

$$k_{3,1,1}=0,36 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}, k_{4,1,1}=0,2 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}, k_{5,1,1}=1,34 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1} \text{ та } k_{6,1,1}=0,4 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}.$$

Власне значення енергії

$$E_{1,1} = 0,153 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

Аналогічно визначаємо власну енергію та хвильові числа для другої радіальної та аксіальної моди  $n=m=2$ :

$$k_{3,2,2}=0,81 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}, k_{4,2,2}=0,7 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}, k_{5,2,2}=0,81 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1} \text{ та } k_{6,2,2}=0,57 \cdot 10^9 \text{ м}^{-1}.$$

Власне значення енергії

$$E_{2,2} = 1,034 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}$$

Будуємо графіки хвильових функцій для радіальної моди (рис. 1.2) при  $A=1$  для  $n=m=1$  та  $n=m=2$ :

$$\varphi_5(r) = \begin{cases} J_0(k_3 \cdot r), & \text{якщо } r \leq R \\ B \cdot K_0(k_5 \cdot r), & \text{якщо } R < r \leq R + d \end{cases} \quad (1.15)$$

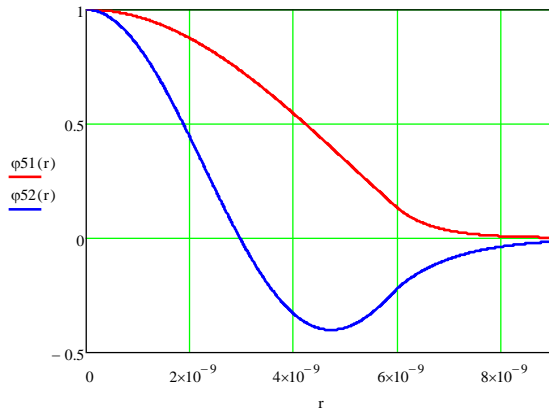


Рис. 1.2. Графіки хвильових функцій для радіальної моди при  $R=6$  нм,  $H=12$  нм,  $d=3$  нм,  $U_0=1,2$  еВ при  $n=m=1$ .

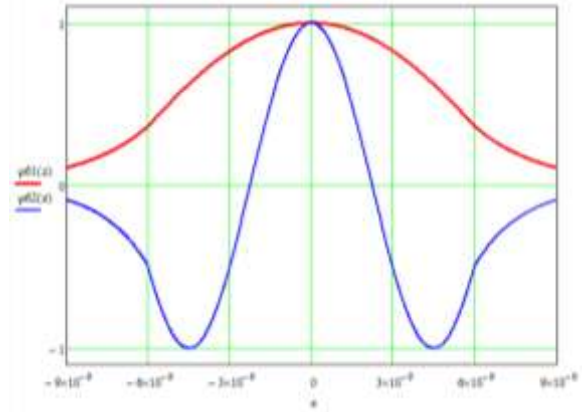
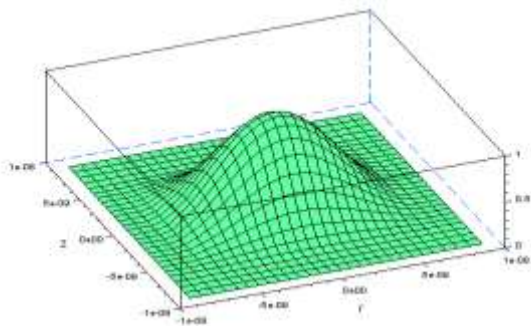


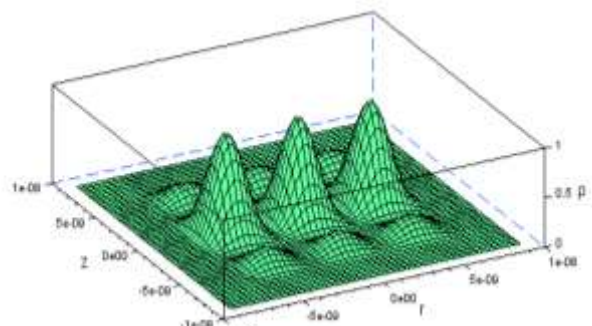
Рис. 1.3. Графіки хвильових функцій для аксіальної моди при  $R=6$  нм,  $H=12$  нм,  $d=3$  нм,  $U_0=1,2$  еВ  $n=m=2$ .

Будуємо графіки хвильових функцій для аксіальної моди (рис. 1.3) при  $A=1$  для  $n=m=1$  та  $n=m=2$ :

$$\varphi_6(z) = \begin{cases} \cos(k_4 \cdot z), & \text{якщо } |z| \leq \frac{H}{2} \\ e^{-k_6 \cdot z}, & \text{якщо } \frac{H}{2} \leq |z| \leq \frac{H}{2} + d \end{cases} \quad (1.16)$$



a)



b)

Рис. 1.4. Графіки щільності ймовірності для аксіальних та радіальних мод при  $R=6$  нм,  $H=12$  нм,  $d=3$  нм,  $U_0=1,2$  еВ: а)  $n=m=1$ ; б)  $n=m=2$ .

Будуємо 3D графіки [14] відносної ( $A=1$ ) щільності ймовірності для електрона у циліндричній квантовій ямі з оболонкою, яка дорівнює:

$$\rho(r, z) = |\psi(r, z)|^2 = \begin{cases} |\psi_1(r, z)|^2, \text{ якщо } |r| \leq R \text{ та } |z| \leq \frac{H}{2} \\ |\psi_2(r, z)|^2, \text{ якщо } R < |r| < R + d \text{ або } \frac{H}{2} \leq |z| \leq \frac{H}{2} + d \end{cases} \quad (1.17)$$

Мінімальна власна енергія електрона у ЦКТ суттєво залежить від розмірів ( $R, H$ ) квантової точки та збільшується, якщо розміри зменшуються. Мінімально допустимі розміри ЦКТ визначаються параметрами кристалічної ґратки:  $D_{\min}, H_{\min}$  приблизно 1 нм. В подальшому значний інтерес представляє розгляд стану електрона у сферичній квантовій точці з оболонкою.

### Висновки до першого розділу

У роботі розглянуто математичне, комп'ютерне моделювання стану електронів у циліндричних квантових точках з оболонкою. Досліджені хвильові функції електрона, власні значення хвильових чисел і енергії та їх залежність від параметрів квантової точки (радіуса, висоти) і параметрів оболонки (товщини, висоти потенціального бар'єру).

Використано рівняння Шредінгера для стаціонарних станів S-електронів у циліндричній системі координат і граничні умови для отримання дискретної моделі та 3D-графіків щільності ймовірності стану електрона в заданій області простору.

Для аналітичного розв'язку рівняння Шредінгера використовується метод Фур'є розділення змінних, а також чисельний метод послідовних наближень (ітерацій) при визначенні власних значень енергії електрона за допомогою граничних умов. Хвильова функція повинна бути неперервною та гладкою на границі ядро-оболонка циліндричної квантової точки.

Фінітний рух електрона розглядається у наближенні ефективної маси. Представлені результати розрахунків власної енергії та хвильових чисел для двох станів електрона: основного стану – аксіальні та радіальні квантові числа дорівнюють  $n=m=1$  та збудженого стану – при  $n=m=2$ .

Для математичного комп'ютерного моделювання та побудови відповідних графіків хвильової функції та щільності ймовірності знаходження електрона в заданій області циліндричної квантової точки використовуються пакети програм Scilab, MathCad, дискретні моделі розв'язку диференціальних рівнянь та дискретні структуровані сітки.

Таким чином, досліджено стан S-електрона, орбітальний момент якого  $l=0$ , у циліндричній квантовій точці з оболонкою та обмежуючим потенціалом. У подальшому представляє значний інтерес моделювання стану електронів для інших різноманітних квантових точок: сферичних, конічних, пірамідальних.

Результати досліджень використовуються для методичного забезпечення лабораторного практикуму для магістрантів спеціальності 122 «Комп'ютерні науки» з курсу «Фізичні основи сучасних інформаційних технологій» та для магістрантів спеціальності 141 «Електроенергетика, електротехніка і електромеханіка» дисципліни «Фізико-математичне забезпечення магістерських програм».

## РОЗДІЛ II. КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК ФОТОЕЛЕКТРИЧНИХ ПЕРЕТВОРЮВАЧІВ

### 2.1. Комп'ютерне моделювання функціональних характеристик фотоелектричних перетворювачів на основі низькорозмірних напівпровідникових гетероструктур

**Вибір параметрів моделювання.** Досліджувалися фотоелектричні перетворювачі на основі гетероструктури n-TiO<sub>2</sub>/p-porous-Si/n-Si. Зверху і знизу структури поверх шарів титану і кремнію було сформовано омічні срібні контакти.

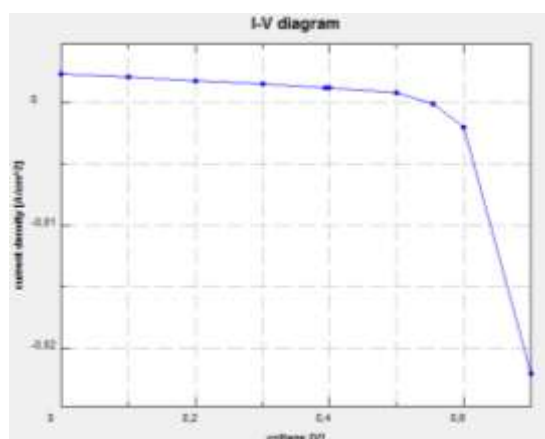
Для числового моделювання робочих характеристик фотоперетворювачів, виконаних на базі напівпровідникових плівок оксиду титану необхідно задати вхідні параметри матеріалів, наприклад, товщину віконного та поглинаючого шарів, ширину забороненої зони матеріалів, їх електронну спорідненість, діелектричні сталі, рухливості електронів та дірок тощо. Базові вхідні параметри шарів, що використовувалися для моделювання фізичних процесів у СЕ, наведені в табл. 2.1.

Структури були досліджені з використанням освітлення повітряною масою 1,5 (АМ 1,5).

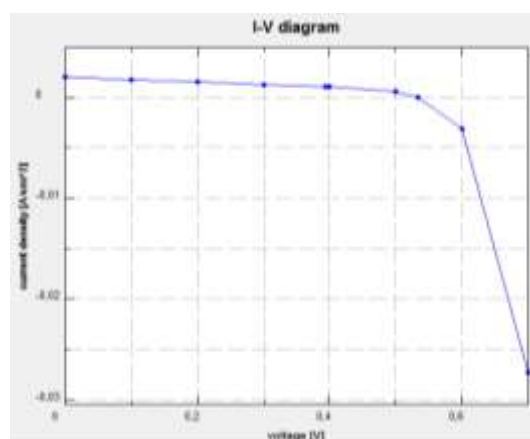
**Вплив експлуатаційної температури на електричні характеристики плівкової системи.** Нагрівання сонячних елементів в робочому режимі може значно погіршити їх робочі характеристики. У зв'язку з цим виникає необхідність дослідження впливу температури на вигляд ВАХ гетероструктури TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si. Під час моделювання температура змінювалася в інтервалі T=290-320 К з кроком ΔT=10 К. Результати розрахунків ВАХ фотоперетворювачів наведено на рис. 2.1.

Таблиця 2.1. Перелік параметрів, використаних у моделюванні [15-23]

№ п/п	Параметр	Шар			
		Si (p)	porous-Si (p)	TiO <sub>2</sub> (n)	Si (n)
1	Спорідненість електронів, eV	4,05	4,05	4,20	4,05
2	Діелектрична константа	11,9	1,6	10,0	11,9
3	Ширина забороненої зони, eV	1,12	2,05	2,26	1,12
4	Оптична ширина забороненої зони, eV	1,12	2,05	2,26	1,12
5	Ефективна щільність зони провідності, см <sup>-3</sup>	2,84·10 <sup>19</sup>	2,84·10 <sup>19</sup>	2·10 <sup>7</sup>	2,84·10 <sup>19</sup>
6	Ефективна щільність валентної полоси, см <sup>-3</sup>	2,68·10 <sup>19</sup>	2,68·10 <sup>19</sup>	6·10 <sup>17</sup>	2,68·10 <sup>19</sup>
7	Рухливість електронів, см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup>	1107	30	100	1111
8	Рухливість дірок, см <sup>2</sup> В <sup>-1</sup> с <sup>-1</sup>	424,6	2	25,0	421,6
9	Концентрація легування акцепторів, см <sup>-3</sup>	1·10 <sup>16</sup>	1·10 <sup>16</sup>	0	0
10	Допінгова концентрація донаторів, см <sup>-3</sup>	0	0	1·10 <sup>17</sup>	5·10 <sup>16</sup>
11	Теплова швидкість електронів, см <sup>-1</sup>	1·10 <sup>7</sup>	1·10 <sup>7</sup>	2,99·10 <sup>6</sup>	1·10 <sup>7</sup>
12	Теплова швидкість дірок, см <sup>-1</sup>	1·10 <sup>7</sup>	1·10 <sup>7</sup>	6,76·10 <sup>6</sup>	1·10 <sup>7</sup>
13	Щільність шару, г см <sup>-3</sup>	2,328	1,9	2,328	2,328
14	Товщина шару, м	150·10 <sup>-6</sup>	1·10 <sup>-6</sup>	15·10 <sup>-6</sup>	150·10 <sup>-6</sup>



а



б

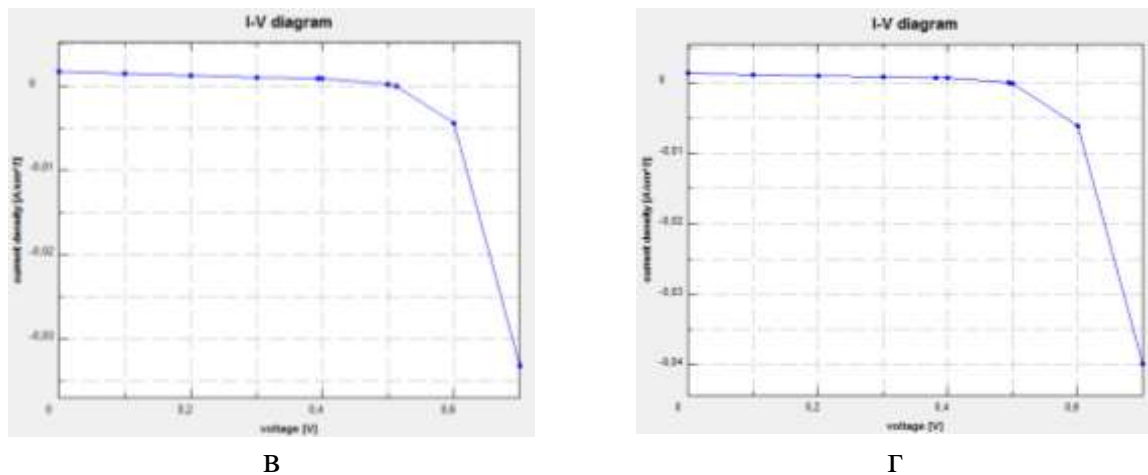


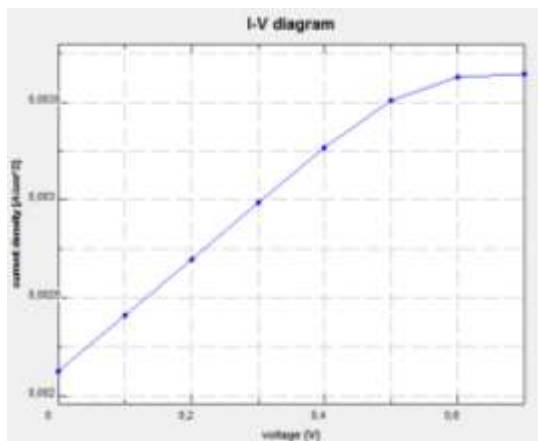
Рис. 2.1. Вольт-амперна характеристика побудована для гетероструктури  $n\text{-TiO}_2/p\text{-porous-Si}/n\text{-Si}$  при температурі:  
 а)  $T=290\text{ K}$ ; б)  $T=300\text{ K}$ ; в)  $T=310\text{ K}$ ; г)  $T=320\text{ K}$

Із результатів проведених досліджень видно, що при збільшенні температури експлуатації сонячного елемента відбувається збільшення значення струму короткого замикання  $J_{SC}$ , а значення напруги розімкненого ланцюга  $V_{OC}$  зменшується.

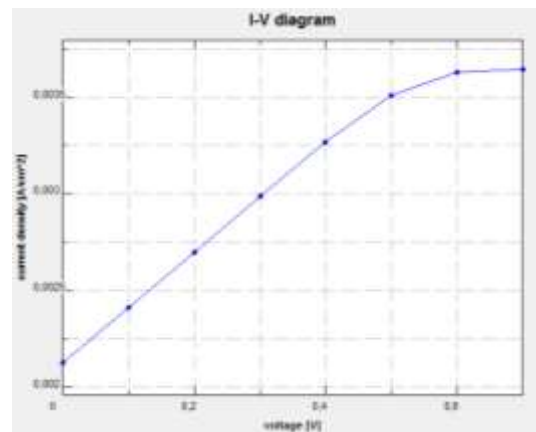
**Вплив товщини шару  $TiO_2$  на параметри сонячних елементів.**  
 Товщина шару діоксиду титану в розглядуваному гетеропереході визначає кількість випромінювання, що надходить до поглинаючого шару ФЕП. Враховуючи це важливим питанням є дослідження її впливу на електричні властивості сонячного елемента.

Під час моделювання було використано наступні вхідні параметри, зазначені в табл. 2.1, змінювалася лише товщина шару  $TiO_2$   $d=(5-20)$  мкм з кроком  $\Delta d=5$  мкм. Результати проведених розрахунків наведено на рис. 2.2.

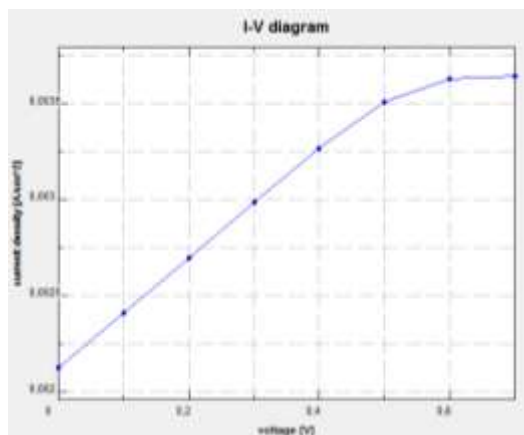
За результатами моделювання встановлено, що у випадку використання ГП  $TiO_2/p\text{-porous-Si}/Si$  при підвищенні товщини шару  $TiO_2$  від 10 до 20 мкм спостерігається незначне зменшення значення струму короткого замикання  $J_{SC}$  від 2,12 до 1,79  $\text{mA}/\text{cm}^2$ , а напруга холостого ходу  $V_{OC}$  залишається практично незмінною для товщини шару  $d=(5-15)$  мкм, але зазнає значних змін при  $d=20$  мкм, що найімовірніше пов'язано зі зміною характеристик гетеропереходу.



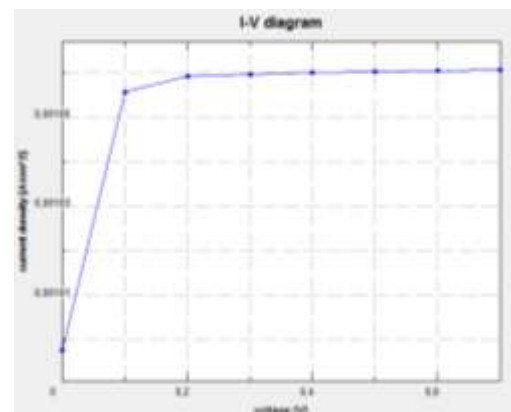
а



б



в



г

Рис. 2.2. Вольт-амперна характеристика побудована для гетероструктури p-TiO<sub>2</sub>/p-porous-Si/n-Si при товщині шару TiO<sub>2</sub> :

а) d=5 мкм; б) d=10 мкм; в) d=15 мкм; г) d=20 мкм.

## 2.2. Моделювання характеристик сонячних елементів на основі поруватого кремнію

**Постановка проблеми.** Однією з основних цілей у фотоелектричних системах є підвищення ефективності сонячних елементів. Багато дослідників показали, що сонячні батареї можна зробити ефективнішим за рахунок застосування гетероперехідних структур [24-26]. Особливістю гетеропереходу, що впливає на ККД сонячного елемента, є відсутність дефектів на стику кристалічних решіток [27, 28], яке можливе лише при збігу типу, орієнтації та періоду кристалічних решіток матеріалів, що зрощуються.

Дане явище можливе, якщо хоча б одна з граней кожної ґрати має близькі геометричні параметри, що легко вирішується під час використання буферних шарів. Таким чином, продумана конструкція буферного шару між плівкою і підкладкою є необхідною для того, щоб пристосуватися до різних значень параметрів кристалічних решіток [29].

Серед різних видів буферних шарів, що використовуються при виробництві гетероперехідних сонячних елементів, особливий інтерес останнім часом належить поруватому кремнієвому шару. Коли його поруватість збільшується, поруватий Si (PS) демонструє знижений коефіцієнт відображення (3-30%) і збільшення забороненої зони (1,1-1,9 eV) [30].

Раніше нами в роботі [31] повідомлялося про те, що значення ККД сонячних елементів на основі гетероструктури CdS/porous-Si/p-Si перевищує на 5,4 % значення ККД для аналогічних структур CdS/p-Si за однакових умов отримання плівки CdS. Експериментальні результати, отримані авторами статті [32], свідчать про збільшення фотогальванічних характеристик сонячного елемента AZO/porous-Si.

Однак на ефективність фотоперетворювачів може впливати безліч параметрів структур, що залежать від якості, морфологічних особливостей та фізичних властивостей шарів, технології виготовлення p-n-переходу, дефектів, що виникають на стику шарів та ін.

Так, при виготовленні гетероструктурних СЕ з буферним поруватим шаром, щільність струму травлення кремнію і структура шару є важливими параметрами, які впливають на фотоелектричні характеристики сонячних елементів. У роботі [33] максимальне значення ККД (6,05%) отримано для сонячної батареї з гетеропереходом ZnO/PS з шаром Si, створеним при щільності травлення струму 25 мА/см<sup>2</sup>. Вплив форми, висоти та ширини структури кремнієвої поверхні на оптичний резонанс розглядалися у роботі [34]. Авторами даної публікації було різко знижено поверхневе відображення майже до нуля за допомогою технології поруватого градієнтного кремнію.

Крім цього, при виготовленні СЕ втрати на відображення зазвичай мінімізуються за рахунок використання просвітлюючих покриттів. Дані матеріали – тонкі плівки із широкою забороненою зоною, високою прозорістю та низьким питомим опором – відіграють роль віконного матеріалу. Найчастіше застосовують такі напівпровідникові оксиди металів, як  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{CuO}$ ,  $\text{Cu}_2\text{O}$ ,  $\text{SnO}_2$  та інші [35-38]. У ряді фотоелектричних пристроїв оксидні плівки використовуються не тільки як віконний матеріал, але і як р-n-гетероперехід.

Так, у [39] спостерігалось поліпшення електричних властивостей гетеропереходу  $\text{TiO}_2/\text{PS}/\text{mc-Si}$  після покриття плівкою  $\text{TiO}_2$ . Як наслідок ефективність сонячних елементів зросла з 1,4% для структури  $\text{PS}/\text{mc-Si}$  без покриття до 5% для структури з покриттям  $\text{TiO}_2$ .

Ефективність сонячних елементів на основі вуглецевих нанотрубок та кремнію  $\text{CNT-Si}$  з оксидним шаром  $\text{WO}_3$ , які поєднують переваги традиційних напівпровідників та нових наноструктур, у поєднанні з методами покриття  $\text{TiO}_2$  та легування  $\text{HNO}_3$ , була досягнута  $>18\%$  при активній площі  $0,09 \text{ cm}^2$  [40].

Однак структури, які широко використовуються при виготовленні фотоперетворювачів, мають деякі обмеження, наприклад складність технологічного процесу осадження, що збільшує вартість виготовлення. Це призводить до необхідності залучення широкого комплексу різних методик, однією з яких є комп'ютерне моделювання.

Мета дослідження полягала у проведенні моделювання характеристик сонячних елементів на основі поруватого кремнію та оптимізації конструкції даних фотоелектричних перетворювачів.

Для розрахунку основних характеристик гетероперехідних СЕ у роботі використано програму PC1D. Ця програма дозволяє моделювати структури, які складаються з напівпровідникових шарів, з різними профілями легування та довільним енергетичним розподілом донорів чи акцепторів у цих шарах.

Для проведення модельних розрахунків було використано параметри функціональних шарів (ширина забороненої зони, концентрація, рухливість, теплова швидкість носіїв заряду, коефіцієнти рекомбінації) наведені у науковій літературі. Деякі параметри кожного шару запропонованих моделей наведено у таблиці 2.2. Моделювання проводилося за кімнатної температури ( $T=300\text{ K}$ ).

Таблиця 2.2. Параметри моделювання фотоперетворювачів [4141-45]

Параметр	Значення			
	Si	porous-Si	TiO <sub>2</sub>	CuO
Товщина шару, мкм	5	0.2	2	2
Електронна спорідненість, eV	4.05	4.05	4.20	4.07
Діелектрична проникність	11.9	1.6	8.6	18.1
Ширина забороненої зони, eV	1.124	2.05	3	1.5
Рухливість електронів, $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	1107	30	100	100
Рухливість дірок, $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	424.6	2	25	0.1
Концентрація легування акцепторів, $\text{cm}^{-3}$	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{16}$	0	0
Концентрація легування донорів, $\text{cm}^{-3}$	0	0	$1 \cdot 10^{16}$	$1 \cdot 10^{16}$

За допомогою PC1D змодельовано функціональні характеристики фотоелементів на основі гетероструктур CuO/Si та TiO<sub>2</sub>/Si з поруватим шаром кремнію та без поруватого шару кремнію (рис. 2.3).

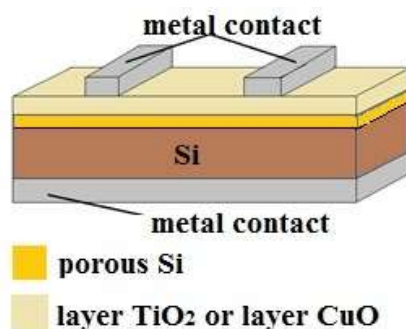


Рис. 2.3. Схематичне зображення розглядуваних сонячних елементів

У процесі виконання роботи були змодельовані параметри гетероструктур TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si, CuO/porous-Si/Si і TiO<sub>2</sub>/Si, CuO/Si.

**Результати моделювання та їх обговорення.** На рис. 2.4 зображено криві залежності щільності струму від напруги (J-V) сонячних елементів CuO/porous-Si/Si, TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si, CuO/Si та TiO<sub>2</sub>/Si при зміщенні для прикладеної напруги в діапазоні від 0 до 0,8 В.

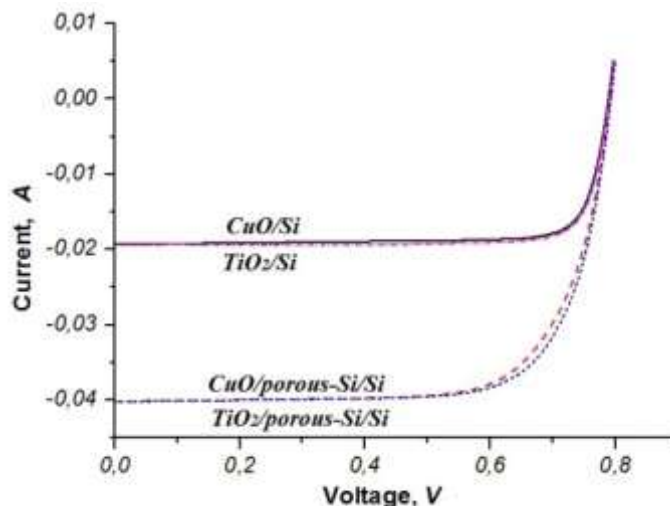


Рис. 2.4. Вольт-амперні характеристики гетероструктур CuO/Si та TiO<sub>2</sub>/Si з поруватим шаром кремнію та без поруватого шару

У таблиці 2.3 наведено отримані значення щільності струму короткого замикання, напруги холостого ходу, а також значення фактору заповнення FF і ККД  $\eta$  розраховані за формулами [31, 46]:

$$FF = \frac{P_{\max}}{V_{OC} \cdot I_{SC}},$$

$$\eta = V_{OC} \cdot I_{SC} \cdot FF.$$

Таблиця 2.3. Основні параметри розглянутих гетероструктурних сонячних елементів

Параметр	Значення			
	TiO <sub>2</sub> /porous-Si/Si	CuO/porous-Si/Si	TiO <sub>2</sub> /Si	CuO/Si
I <sub>SC</sub> , mA/cm <sup>2</sup>	40.2	40.1	19.3	19.2
V <sub>OC</sub> , мВ	793	792	790	789
ККД, %	23.6	23.0	12.6	12.5

Відповідно до отриманих даних, значення ККД для гетероструктур з використанням і без використання поруватого шару Si відрізняються на  $\approx 10\%$ . З рис. 2.4 видно, що ефективність перетворення енергії сонячного елемента з використанням шару поруватого кремнію збільшується на  $\sim 10\%$ , досягаючи 23,6%.

Однією зі значних проблем експлуатації сонячних елементів є їх перегрів. Тому доцільним є дослідження впливу температури на ККД сонячних елементів. Дана залежність сонячних елементів на основі гетероструктур CuO/porous-Si/Si та TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si при різних значеннях температури вказані на рис. 2.5. Діапазон температур становив 280-330 К.

Отримані результати підтверджують, що температура впливає на струм і напругу сонячного елемента. Напруга фотоелементу спадає. Підвищення температури дещо збільшує струм сонячного елемента. Дане явище пов'язано зі збудженням великої кількості електронно-діркових пар. Однак ця зміна для обраного діапазону температур складає  $\sim 0,6-0,7$  мА/см<sup>2</sup>. Зміна струму короткого замикання і напруги призводить до зміни коефіцієнта заповнення й ефективності сонячних елементів.

З метою дослідження впливу товщини поруватого шару моделювання було виконано шляхом зміни його з 0,1 до 1 мкм. Товщина оксидних плівок та інші параметри пристрою залишалися незмінними, як зазначено в табл. 2.3. Встановлено, що зміна товщини поруватого шару несуттєво впливає на струм короткого замикання. Значення щільності струму короткого замикання склали 40,1 і 40,2 мА/см<sup>2</sup> для структур CuO/porous-Si/Si та TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si відповідно. При цьому відбувається зміна значення напруги холостого ходу, яка набирає максимального значення при товщині поруватого шару 0,6-0,7 мкм. З аналізу результатів моделювання видно, що ККД СЕ на основі гетероструктур CuO/porous-Si/Si при зміні товщини поруватого шару змінюється на 0,8%, в той час як ефективність для СЕ на основі гетеропереходу TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si змінюється на 0,4%. Залежність ККД фотоперетворювачів від товщини поруватого шару представлені на рис. 2.6.

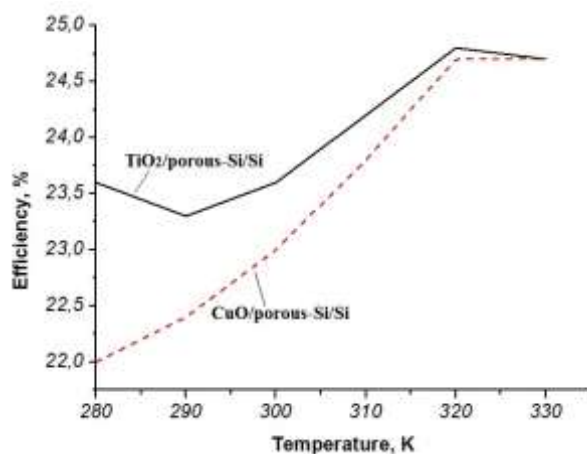


Рис. 2.5. Залежність ефективності сонячних елементів на основі гетероструктур CuO/porous-Si/Si та TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si від температури

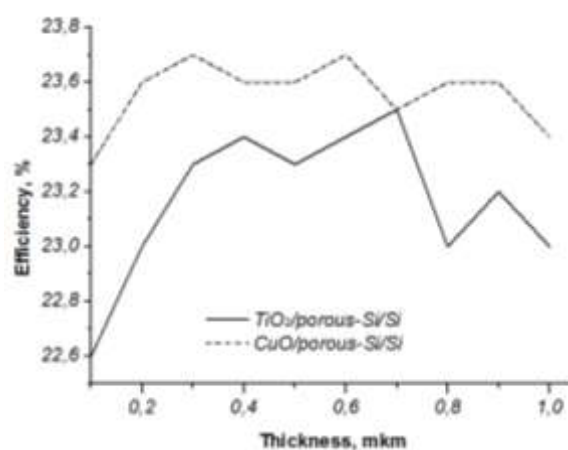


Рис. 2.6. Залежність ККД фотоперетворювача на основі гетероструктур CuO/porous-Si/Si і TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si від товщини поруватого шару

Дифузія до створення р-п-переходу є дуже значним чинником у виробництві сонячних елементів [47]. Хоча велика внутрішня поверхня поруватих матеріалів робить процес легування досить складним [48], все ж таки оцінка впливу легування поруватого шару Si на ефективність фотоперетворювачів є дуже важливим питанням. Для моделювання концентрацію легування було змінено на п'ять порядків з  $1 \times 10^{15}$  до  $1 \times 10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ . Дані значення перебувають у межах досяжних емпіричним шляхом значень.

Результати моделювання показують, що напруга холостого ходу гетероструктури TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si зростає зі збільшенням концентрації легування аж до значення  $1 \times 10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$ . Зміна значення  $V_{OC}$  становить 294 мВ. Дещо інша картина спостерігається для гетероструктури CuO/porous-Si/Si – після досягнення значення концентрації легування  $10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$  відбувається різке зниження напруги холостого ходу – від 804,4 до 546,0 мВ. При цьому для обох структур суттєве зменшення щільності струму короткого замикання відбувається при значенні рівня легування шару поруватого  $10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$  на

4,2 мА/см<sup>2</sup> і 25,9 мА/см<sup>2</sup> для TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si і CuO/porous-Si /Si відповідно (табл. 2.4). Дане явище найімовірніше пов'язане з підвищеною швидкістю поверхневої рекомбінації сильно легованих шарів.

Таблиця 2.4. Основні параметри досліджуваних гетероструктурних сонячних елементів із поруватим буферним шаром

<b>TiO<sub>2</sub>/porous-Si/Si</b>			
<b>Концентрація легування, см<sup>-3</sup></b>	<b>I<sub>SC</sub>, мА/см<sup>2</sup></b>	<b>V<sub>OC</sub>, мВ</b>	<b>ККД, %</b>
1x10 <sup>15</sup>	40,2	780,1	22,3
1x10 <sup>16</sup>	40,2	793,2	23,6
1x10 <sup>17</sup>	40,2	795	24,1
1x10 <sup>18</sup>	40,1	804,4	26,2
1x10 <sup>19</sup>	36	809,5	24,1
<b>CuO/porous-Si/Si</b>			
<b>Концентрація легування, см<sup>-3</sup></b>	<b>I<sub>SC</sub>, мА/см<sup>2</sup></b>	<b>V<sub>OC</sub>, мВ</b>	<b>ККД, %</b>
1x10 <sup>15</sup>	40,1	780,9	22,1
1x10 <sup>16</sup>	40,2	792	23
1x10 <sup>17</sup>	40,2	795,3	23,9
1x10 <sup>18</sup>	40,1	804,4	26,2
1x10 <sup>19</sup>	14,2	546	5,9

На рис. 2.7 показано зміну ефективності сонячного елемента, залежно від концентрації легування шару поруватого кремнію.

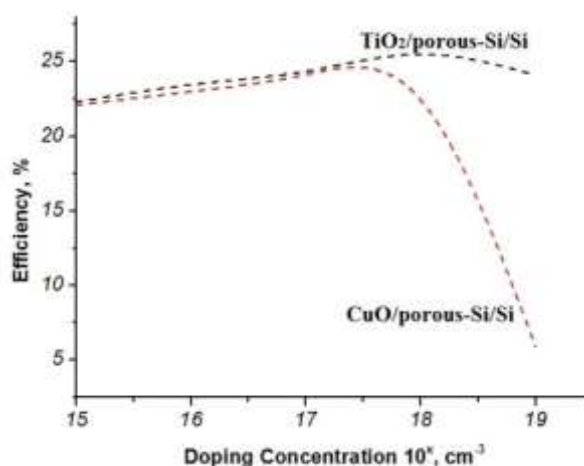


Рис. 2.7. Залежність ККД сонячного елемента від рівня легування поруватого кремнію

### 2.3. Моделювання фотоелектричних характеристик гетероперехідного сонячного елемента ZnO/porous-Si/Si

**Постановка проблеми.** Дефіцит викопного палива та пагубний його вплив на оточуюче середовище призводить до зростання залежності людської діяльності від відновлюваних джерел енергії. Однією з найбільш перспективних серед відновлюваних джерел енергії вважається сонячна енергія [49]. На сьогодні достатнього поширення отримали гетероперехідні монокристалічні кремнієві сонячні елементи, проте їх ефективність не перевищує 19 %. Однак вартість виробництва та монтажу монокристалічних кремнієвих панелей досить висока. Меншою є вартість полікристалічних кремнієвих фотоперетворювачів (~10 %), проте ефективність даних панелей зменшується ~5 %.

Прагнучи до здешевлення виробництва і підвищення ККД сонячних елементів (СЕ), вчені вдаються до різноманітних маніпуляцій з конструкціями фотоперетворювачів, матеріалами, які використовуються при їх виробництві тощо [50-52]. Підвищити ефективність, не збільшуючи при цьому вартість фотоперетворювача (ФП), можна завдяки використанню антивідбивного покриття, які дозволяють за рахунок збільшення кількості поглинутого поверхнею сонячної батареї світла значною мірою підвищити ефективність сонячних елементів. Наразі у фотоелектричній промисловості домінують такі антивідбивні покриття як ITO, TiO<sub>2</sub>, SnO<sub>2</sub>, LiF, MgF<sub>2</sub> тощо [53-55], проте найбільшого розповсюдження отримали прозорі провідні оксиди (ППО). Крім цього останнім часом з'являються роботи, в яких як антивідбивні покриття використовують поруваті напівпровідники [56].

Тому актуальним є питання дослідження фотоперетворювачів із використанням як поруватих кремнієвих шарів, так і антивідбивних покриттів.

*Аналіз останніх досліджень.* Відомими прозорими провідними оксидами, які широко використовуються як вікна, а також як випромінювачі на кремнієвій підкладці p-Si, є CdO, SnO<sub>2</sub> та ITO [57-59]. Однак деякі з них

мають певні недоліки, такі як дефіцит, висока вартість основного інгредієнта, токсичність і низька стабільність. Кандидатом з мінімальною кількістю недоліків є оксид цинку ZnO, оскільки він при кімнатній температурі володіє відносно великою прямою забороненою зоною (3,3-3,4 eV), великою енергією зв'язку екситонів 60 MeV [60], низьким питомим опором, рухливістю Холла близько  $200 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  [61], високим коефіцієнтом пропускання для видимого світла тощо. Завдяки цьому ZnO є перспективним прозорим струмопровідним оксидом як альтернатива FTO та ITO [62].

У більшості застосувань ZnO використовується як віконний шар сонячних елементів для поглинання максимуму падаючого світла [63-65]. Дослідження сонячних елементів з ZnO як ППО не є новим, однак ще існує низка нерозв'язаних питань. Так у роботі [66] автори вивчали вплив температури осадження плівки ZnO на параметри сонячних елементів ZnO/Si. У [67] було досліджено електронну структуру інтерфейсу між легованим бором оксигенованим аморфним кремнієвим «віконним шаром» (a-SiO<sub>x</sub>:H(B)) та оксидом цинку, легованим алюмінієм (ZnO:Al). Леговані плівки ZnO (ZnO:Ga, ZnO:Al, ZnO:B, ZnO:In тощо) також поліпшують оптичні властивості структур та сонячних елементів на їх основі [68-70]. Jiangnan Ding та інші [71] повідомляють про зростання ККД до 17,13 % при використанні нелегованих комбінованих шарів ZnO/ZnO:Al в гетероструктурних кремнієвих сонячних елементах. Результати в [72] доводять поліпшення електричних та оптичних властивостей плівок Ga:ZnO по відношенню до нелегованої плівки ZnO, одночасно авторами досліджено інтерфейс між плівкою та підкладкою Si з метою виявлення конкретних проблем, які можуть перешкоджати оптимальному електричному контакту між ними.

З іншого боку, ZnO може бути не лише віконним шаром в СЕ, але й виступати частиною р-n переходу, що розділяє фотозгенеровані носії, у сонячному елементі на основі ZnO/p-Si [73]. Теоретично прогнозується, що гетероперехідний сонячний елемент Si/ZnO матиме ефективність перетворення до 25 % [74]. Проте в переважній більшості робіт доведено, що

ефективність перетворення сонячних елементів ZnO/Si значною мірою залежить від властивостей інтерфейсу між плівками ZnO та кремнієвою підкладкою [75, 65]. Наприклад, Chen L. та інші [65] пропонують модель сонячних батарей з гетеропереходом n-ZnO/p-Si та буферним тонким шаром ZnO:B, які, згідно моделювання, можуть досягати ККД ~17,16 %. Кандидатом на використання як буферного шару в сонячних елементах на основі Si є сульфід кадмію. Nawfal Jamil та інші [76] експериментально встановили, що ККД сонячних елементів ZnO/CdS/Si становить 8,9 %. Останнім часом особливу увагу дослідників привертають поруваті наноматеріали і наноматеріали із спеціальними фізико-хімічними властивостями, представником яких є поруватий кремній, що використовуються як самостійні покриття, а також буферні шари. Так у роботі [77] періодичний масив стовпців Si використовується для формування фотоелектричної системи n-ZnO/p-Si завдяки зменшенню об'єму активного матеріалу та максимізації оптичного поглинання. Автори роботи [78] демонструють покращення ефективності (до 18,97 %) гетеропереходів c-Si/ZnO за наявності трапецієподібних пірамід c-Si на вершині активного шару c-Si.

І хоча експериментально виготовлені сонячні елементи в досліджуваних роботах показують ефективність нижче теоретично прогнозованих значень [79], моделювання є ефективним засобом дослідження сонячних елементів, завдяки якому можна підібрати оптимальні параметри шарів, оптимізувати конструкцію сонячного елемента, дослідити взаємодію шарів комірки, мінімізувати дефекти інтерфейсу між шарами гетероструктури тощо, при цьому не витрачаючи ресурси (матеріали, кошти) на експериментальний підбір даних параметрів.

Для оцінки оптимального числового значення ключових фотоелектричних параметрів для сонячних елементів можуть бути використані такі програмні пакети, як AFORS-NET, PC1D, AMPS-1D, SCAPS та ін. Так у роботі [80] авторами отримано ККД  $\eta=24,8\%$  моделюванням в програмі PC1D сонячної комірки на основі гетероструктури ZnO/Si при

товщині основи 400 мкм, товщині випромінювача 20 мкм, концентрації легування  $1,1 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$  в основі і концентрації легування  $5,1 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$  у випромінювачі.

Дещо нижчої ефективності фотоелектричного перетворення 20,23 % було досягнуто моделюванням для c-Si сонячних елементів пірамідально-текстурованої лицьової поверхні з використанням нанострижневих масивів ZnO як антивідбивного шару [81]. Крім того, моделювання в програмі PC1D демонструє, що фотоелектрична властивість для даних сонячних елементів набагато краще, ніж для c-Si сонячних елементів без шару ZnO.

Таким чином, в деяких наукових роботах пропонується використовувати ZnO як віконний або антивідбивний шар сонячної батареї для підвищення ефективності, відомі наукові дослідження, в яких повідомляється про використання ZnO як n-шару в гетероструктурних кремнієвих сонячних елементах, також відомі роботи, в яких як буферний шар використовується періодичний масив стовпців Si, однак не так багато є досліджень використання ZnO як n-шару, так і антивідбивного покриття з використанням проміжного шару porous-Si одночасно для сонячної батареї.

**Метою роботи** є проведення чисельного моделювання та оптимізації функціональних характеристик фотоперетворювача на основі гетероструктур ZnO/porous-Si/Si, а також дослідження впливу технологічних параметрів на характеристики конструкції.

**Основна частина.** Моделювання основних характеристик сонячного елемента на основі гетероструктури ZnO/porous-Si/Si проведено у вільно розповсюдженій програмі PC1D [82, 83]. Це програмне забезпечення, розроблене Університетом Нового Південного Уельсу (Австралія), дозволяє зв'язати електричні характеристики напівпровідникового пристрою з його топологією. Результати моделювання дозволили отримати числові значення напруги холостого ходу  $V_{oc}$  і струму короткого замикання  $I_{sc}$ . Значення коефіцієнту заповнення FF та ефективності  $\eta$  теоретично розраховано за формулами [84, 85]:

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc} \cdot I_{sc}}$$

$$\eta = V_{oc} \cdot I_{sc} \cdot FF.$$

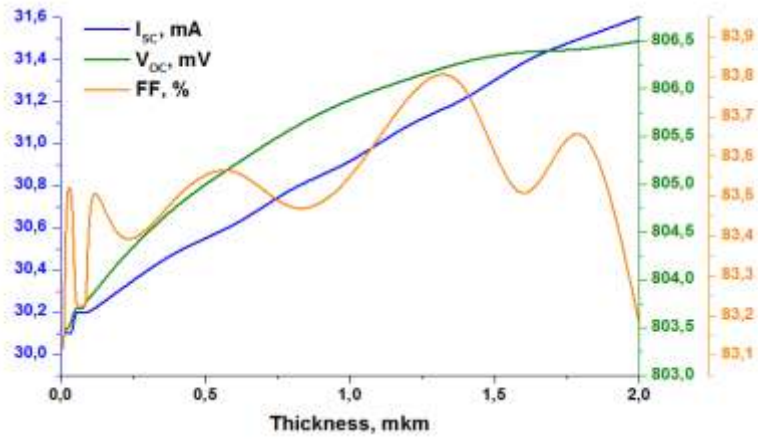
Моделювання було виконано шляхом зміни товщини шару ZnO і товщини porous-Si шляхом фіксації другої з метою вивчення ролі кожного параметра на продуктивності комірки. У першому випадку товщина поруватого кремнієвого шару фіксувалася на значенні 0,2 мкм, у другому – 500 мкм, при цьому значення товщини покриття ZnO змінювалося від 10,0 нм до 2,0 мкм. Товщина кремнієвої підкладки залишалася незмінною.

Електричні та оптичні параметри матеріалів, використані в цьому моделюванні (табл. 2.5), були вибрані з баз даних програмних пакетів для моделювання сонячних елементів та наукової літератури [86-89].

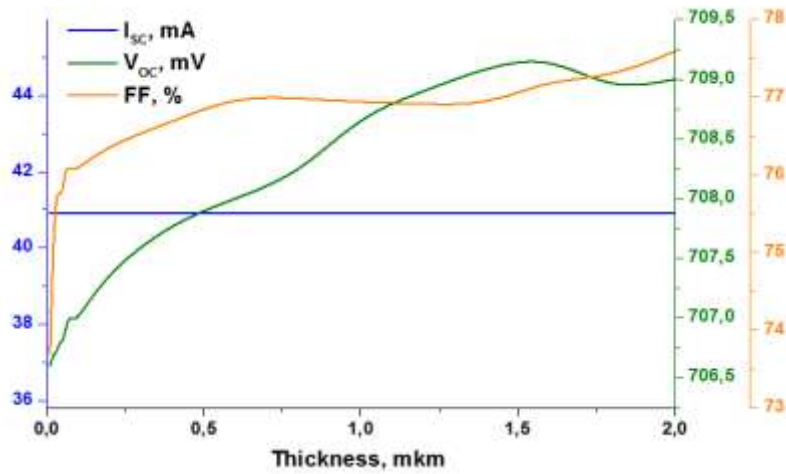
Таблиця 2.5. Параметри моделювання сонячних елементів

Параметр	Значення для шару		
	ZnO	Si	porous-Si
Електронна спорідненість, eV	4.0	4.05	4.05
Діелектрична проникність	9.0	11.9	1.6
Ширина забороненої зони, eV	3.3	1.124	2.05
Рухливість електронів, $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	100	1107	30
Рухливість дірок, $\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	25.0	424.6	2.0
Концентрація легування акцепторів, $\text{cm}^{-3}$	0	$1 \cdot 10^{16}$	варіюється
Концентрація легування донорів, $\text{cm}^{-3}$	варіюється	0	0

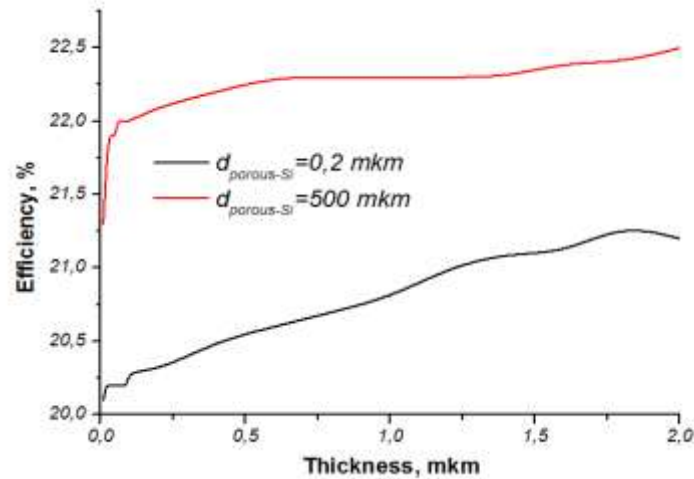
**Вплив товщини шарів ZnO та porous-Si на електрофізичні властивості сонячного елемента.** Товщина шару ZnO визначає кількість випромінювання, що надходить до кремнієвого шару фотоперетворювача, тому доцільним є дослідження впливу товщини шарів ZnO та porous-Si на електричні властивості ФП. На рис. 2.8 показано зміни струму короткого замикання  $I_{sc}$ , напруги холостого ходу  $V_{oc}$ , фактору заповнення FF, ефективності при різних значеннях товщини плівки ZnO та шару porous-Si.



а



б



в

Рис. 2.8. Залежність оптоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si від різних значень товщини плівки ZnO:

а) струм короткого замикання  $I_{SC}$ , напруга холостого ходу  $V_{OC}$ , фактор заповнення  $FF$  при товщині поруватого шару  $d_{porous-Si}=0,2$  мкм;

б) струм короткого замикання  $I_{SC}$ , напруга холостого ходу  $V_{OC}$ , фактор заповнення FF при товщині поруватого шару

$$d_{\text{porous-Si}}=500 \text{ мкм};$$

в) ефективність фотоперетворювача при різних значеннях товщини поруватого шару.

Встановлено, що для ZnO товщиною 2 мкм було отримано найвищий ККД 22,5 %, тобто ККД зростає, коли товщина покриття ZnO збільшується до 1,8 мкм, і зменшується з подальшим збільшенням товщини, що вказує на оптимальну товщину для кращої продуктивності. Результат очікуваний, оскільки поглинені фотони прямо пропорційні товщині активного шару. Однак подальше збільшення товщини активного шару викликає рекомбінацію вільних носіїв заряду, що сприяє зниженню ККД [90].

Відмічається, що для розглянутих товщин поруватого кремнієвого шару значною мірою відрізняються значення фактору заповнення  $\sim 10\%$ . Значення струму короткого замикання, у другому випадку (рис. 2.8, б) в заданому діапазоні товщин змін не зазнає.

***Вплив рівня легування шару ZnO на електрофізичні властивості сонячного елемента.*** Значна частина світла поглинається поверхнею сонячного елемента, що призводить до високої швидкості генерації, тому вивчення впливу концентрації легуючих домішок повинні бути детально досліджені.

Під час моделювання товщина шару ZnO становила 2,0 мкм, для шару поруватого Si – 200 нм, решта параметрів відповідала зазначеним в табл. 2.5. Результати моделювання наведено на рис. 2.9.

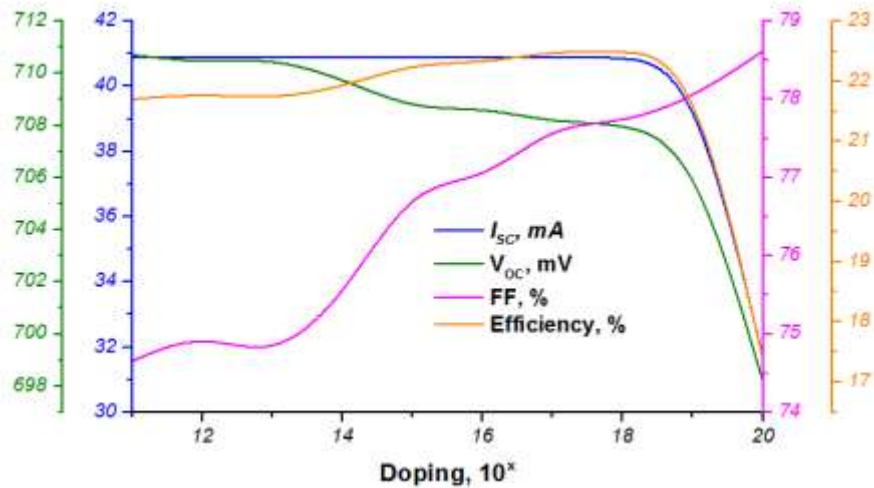


Рис. 2.9. Залежності оптоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si від рівня легування покриття ZnO.

Згідно рис. 2.9 висока концентрація легування в шарі ZnO призводить до зниження загальної ефективності через зниження пропускання світла, поглинання та вищої швидкості рекомбінації [91]. Але при значеннях легування  $10^{12}$ - $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$  ефективність SE також знижується, що найімовірніше пов'язано зі зниженням швидкості дрейфу та зростанням опору структури.

Таким чином, при високих значеннях концентрації легування та товщини плівки ZnO світло майже не проникає в кремнієву підкладку, що впливає на генерацію носія заряду і призводить до зниження ефективності пристрою. Максимальне значення ККД досягається при концентрації легування донорів  $\sim 10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$ .

**Вплив текстурування шарів ZnO на електрофізичні властивості сонячного елемента.** Ефективність сонячних елементів із гетеропереходом ZnO/Si можна підвищити шляхом максимізації шорсткості поверхні ZnO на кремнієвих мікропорах. Важливою технікою для зменшення відбиття світла є текстурування поверхні, у зв'язку з цим було проведено моделювання фотоперетворювача ZnO/porous-Si/Si при значеннях кута текстурування в межах 40-85° (табл. 2.6).

Таблиця 2.6. Зміна оптоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si при зміні кута текстурування поверхні фотоперетворювача

Кут текстурування, градуси	Сила струму, I <sub>SC</sub> , мА	Напруга, V <sub>OC</sub> , мВ	Фактор заповнення FF, %	ККД, %
40	40,9	708,7	76,6	22,2
45	40,9	708,7	76,6	22,2
50	40,9	708,7	76,9	22,3
55	40,9	708,7	76,9	22,3
60	41	708,7	76,7	22,3
65	41	708,7	77,1	22,4
70	41,1	708,6	76,9	22,4
75	41,1	708,4	77,3	22,5
80	41,2	708,3	77,4	22,6
85	41,3	708	77,6	22,7

Аналіз зміни оптоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si в залежності від кута текстурування поверхні фотоперетворювача (табл. 2.6) показує, що ефективності перетворення сонячної енергії набуває максимального значення при куті 85° за рахунок зменшення відбиття світла від лицьової поверхні та уловлювання світла в сонячних елементах. Збільшення кількості фотонів, які можуть бути поглинені сонячним елементом, призводить відповідно до більшої щільності струму короткого замикання.

Таким чином, за рахунок текстурування поверхні відбувається збільшення площі гетеропереходу, що призводить до появи більшої кількості електронно-діркових пар під час освітлення та підвищення ефективності сонячних батарей (рис. 2.10).

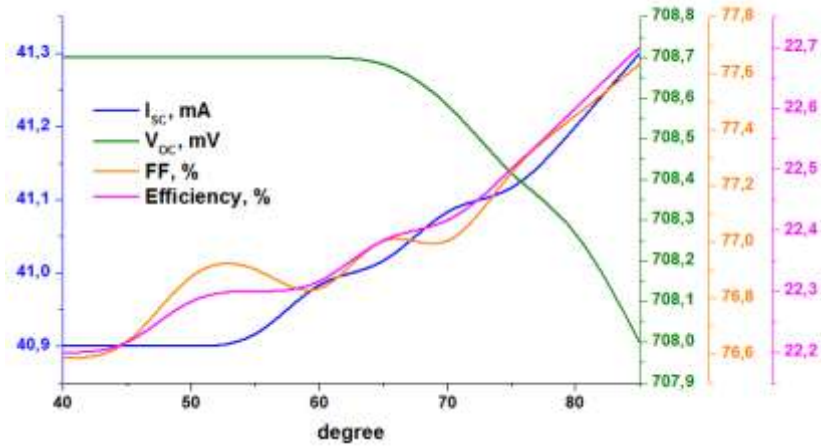


Рис. 2.10. Залежності оптоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si від кута текстурування поверхні фотоперетворювача.

**Вплив температури сонячного елемента на електрофізичні властивості.** Робоча температура значною мірою впливає на ефективність фотоелектричної панелі. З метою дослідження даного впливу було проведено моделювання фотоелектричних параметрів гетероструктури ZnO/porous-Si/Si від різних значень температур у діапазоні від 280 К до 340 К. Отримані значення представлені на рис. 2.11.

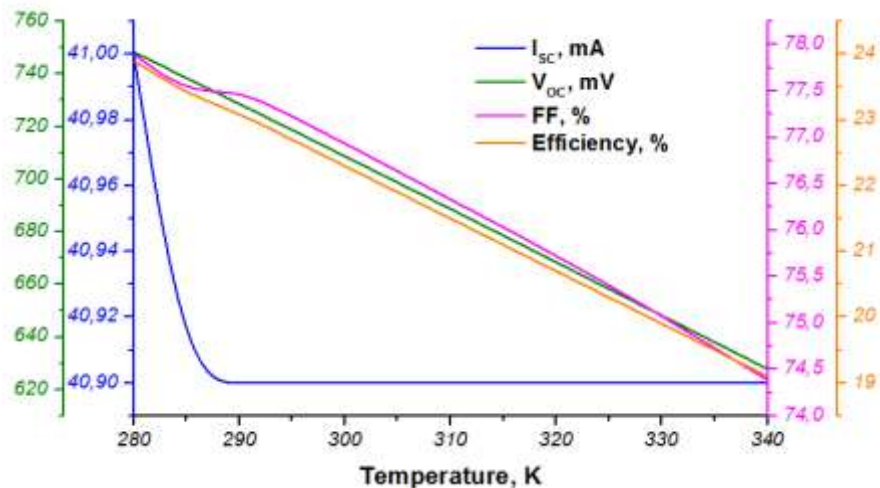


Рис. 2.11. Оптоелектричні параметри фотоперетворювача на основі гетероструктури ZnO/porous-Si/Si при різних значеннях температури.

Рис. 2.11 демонструє, що підвищення температури значною мірою впливає на продуктивність сонячної батареї, призводячи до зменшення ККД.

Найкраще значення ефективності досягається при 280 К, де коефіцієнт заповнення FF становить майже 78 %. Вплив температури є результатом властивих кремнієвим сонячним елементам характеристик – підвищення напруги зі зниженням температури.

#### **2.4. Моделювання та оптимізація сонячних елементів CdS/CdTe з одношаровими антивідбивними покриттями**

Сонячна енергетика стає все більш актуальною в контексті пошуку сталого джерела енергії для сучасного суспільства. Фотоперетворювачі (ФЕП) на основі гетероструктури CdS/CdTe виявляються досить перспективними для виробництва ефективних сонячних елементів [92-93]. У порівняння з комерційними кремнієвими панелями CdS/CdTe панелі все ще мають нижчу потужність конверсії, однак сонячні елементи CdS/CdTe отримують велику увагу завдяки високій ефективності перетворення сонячної енергії, високій стійкості до деградації під впливом навколишнього середовища, простоті виробництва тощо [94-95]. Унікальні властивості цих матеріалів дають можливість досягти значних покращень у сфері фотовольтаїки. Збільшити ефективність ФЕП за рахунок збільшення кількості фотонів, які досягають активного шару сонячного елемента, можна досягти за допомогою нанесення антивідбивного покриття [96].

У зв'язку з вищезазначеним актуальним є питання максимізації потенціалу ФЕП на основі гетероструктури CdS/CdTe шляхом оптимізації її структури та властивостей.

Мета роботи полягає в дослідженні фотовольтаїчних параметрів гетероструктури CdS/CdTe. Основний акцент дослідження спрямовано на вивчення впливу параметрів антивідбивного покриття на ефективність сонячних елементів CdS/CdTe та їхню оптимізацію.

Моделювання електричних та оптичних властивостей сонячних елементів на основі гетероструктури CdS/CdTe було проведено за допомогою

програмного забезпечення PC1D. PC1D дозволяє враховувати вплив різних фізичних параметрів, таких як товщина та склад шарів, умови вирощування та обробки матеріалів, на характеристики сонячного елемента [97]. За результатами моделювання отримано вольт-амперну характеристику гетероструктури CdS/CdTe (рис. 2.12), а також напругу холостого ходу, струм короткого замикання, максимальну потужність. Розрахунок коефіцієнту заповнення та ефективності проведено за формулами наведеними в [98].

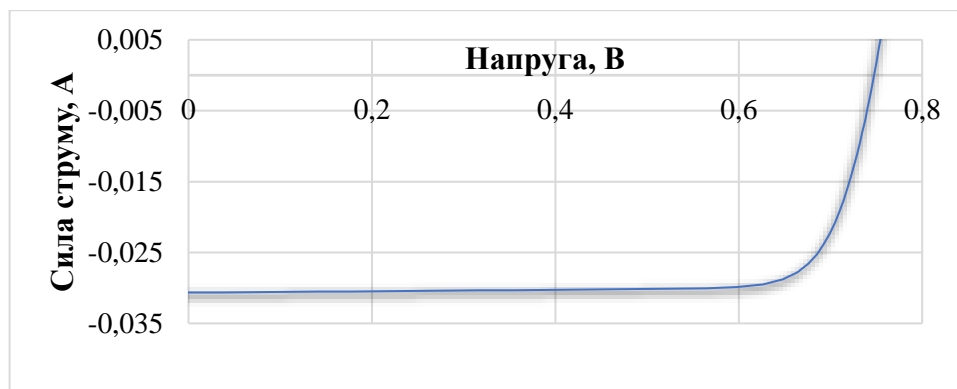


Рис. 2.12. Вольт-амперна характеристика фотоперетворювача CdS/CdTe

Згідно отриманих даних ККД сонячного елемента CdS/CdTe без антивідбивного покриття становить 18,7% (табл. 2.7).

Таблиця 2.7. Фотовольтаїчні параметри виготовлених ФЕП на основі гетероструктури CdS/CdTe

Антивідбивне покриття	Показник заломлення	Струм короткого замикання $I_{sc}$ , мА	Напруга холостого ходу $V_{oc}$ , мВ	ККД $\eta$ , %
Гетероструктура CdS/CdTe <b>без</b> антивідбивного покриття				
-	-	30,7	747,5	18,7
Гетероструктура CdS/CdTe <b>з</b> антивідбивним покриттям				
SiO <sub>2</sub>	1.4585 [99]	33,3	749,6	20,3
ZnO	2.0034 [100]	31,9	748,5	19,4
ITO	1.8270 [101]	32,6	749,1	19,9
TiO <sub>2</sub>	2.6142 [102]	28,3	745,4	17,1
ZnS	2.3677 [103]	28,7	745,8	17,4
AZO	1.8284 [104]	32,6	749,1	19,9

FTO	2.2401 [105]	29,6	746,6	18,0
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.7682 [106]	32,9	749,4	20,1

Ефективність сонячних елементів значно залежить від показника заломлення антивідбивного покриття, що пов'язано зі зменшенням втрат світла в покритті через відбивання та збільшенні кількості фотонів, які проникли в активний шар сонячного елемента. Наступним кроком було дослідження гетероструктури CdS/CdTe з антивідбивними покриттям, які було вибрано як найперспективніші згідно досліджень вітчизняних та закордонних вчених. Встановлено, що ефективність сонячного елемента збільшується у випадках використання матеріалів з меншим показником заломлення (табл. 3.1), дана залежність представлена на рис. 2.13.

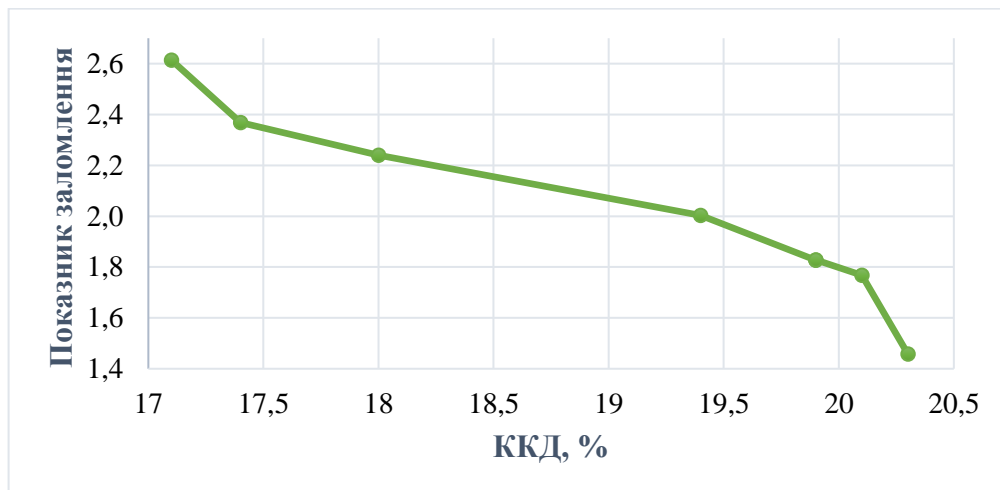


Рис. 2.13. Залежність ККД ФЕП на основі гетероструктури CdS/CdTe від показника заломлення антивідбивного покриття

Таким чином, найвищий ККД досягається при використанні покриття SiO<sub>2</sub>, а найменший – для TiO<sub>2</sub>. Однак для всіх покриттів товщина становила 100 нм, а, як відомо, ефективність сонячних елементів може змінюватися залежно від товщини антивідбивного покриття. Для знаходження оптимальної товщини TiO<sub>2</sub> було проведено моделювання для значень товщини покриття в межах 10-100 нм (рис. 2.14).

Встановлено, що ККД сонячного елемента  $\text{TiO}_2/\text{CdS}/\text{CdTe}$  в заданих межах товщин покриття змінюється на 0,7%, тобто зменшення товщини антивідбивного покриття допомагає знизити втрати світла через відбивання від поверхні сонячного елемента за рахунок збільшення кількості фотонів, які досягають активного шару сонячного елемента. Найбільше значення ККД (17,5%) досягається при товщині  $\text{TiO}_2$  рівній 60 нм.

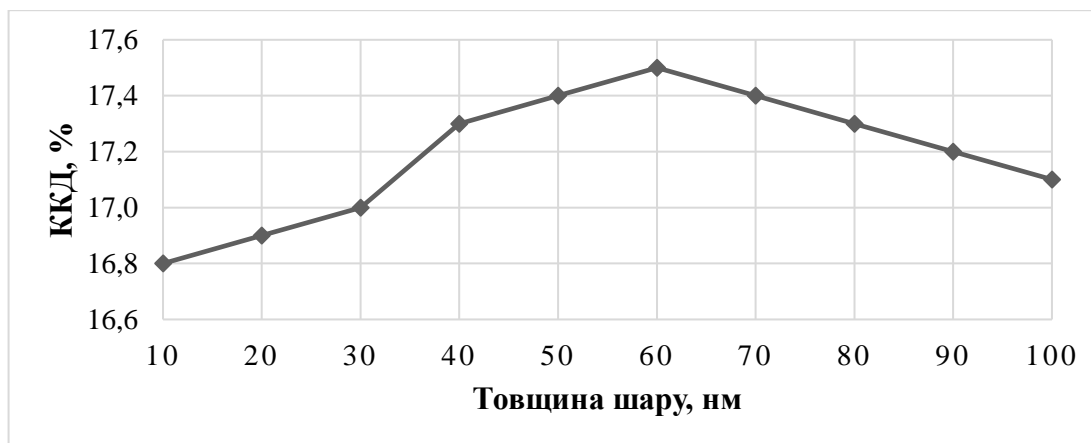


Рис. 2.14. Залежність ККД ФЕП на основі гетероструктури  $\text{CdS}/\text{CdTe}$  від товщини антивідбивного шару  $\text{TiO}_2$

### Висновки до другого розділу

У межах досліджень з комп'ютерного моделювання функціональних характеристик фотоелектричних перетворювачів виконано комплексний аналіз гетероструктур на основі оксидних матеріалів, поруватого кремнію та тонкоплівкових напівпровідників. Моделювання структур  $\text{TiO}_2/\text{p-Si}$ ,  $\text{TiO}_2/\text{Si}$  та  $\text{CuO}/\text{Si}$  показало, що використання оксидних шарів і поруватого кремнію сприяє зростанню струму короткого замикання, покращенню оптичних властивостей та підвищенню ефективності перетворення. Дослідження багатошарових систем  $\text{Ga}_2\text{O}_3/\text{SiC}/\text{porous-Si}/\text{Si}$  дозволило встановити особливості переносу заряду та вплив інтерфейсних шарів на електрофізичні параметри.

Оптимізація гетероструктур ZnO/porous-Si/Si дала змогу визначити раціональні товщини шарів і параметри легування, що забезпечують досягнення високих значень ККД. Моделювання тонкоплівкових структур CdS/CdTe з антивідбивними покриттями підтвердило ефективність підбору оптичних параметрів для зменшення втрат на відбиття та підвищення поглинання світла.

Отримані результати демонструють, що поєднання поруватих напівпровідників, оксидних плівок та оптимізованих антивідбивних шарів є перспективним напрямом підвищення ефективності фотоелектричних перетворювачів. Комп'ютерне моделювання дозволило визначити ключові конструктивні та технологічні параметри, що забезпечують стабільне зростання продуктивності гетероструктурних сонячних елементів і підтверджують їхній потенціал для створення високоефективних та економічно доступних енергетичних систем нового покоління.

## РОЗДІЛ III. МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ

### 3.1. Когнітивне моделювання управління туризмом

Основна проблема полягає в тому, як незначною дією підштовхнути систему на один із сприятливих шляхів розвитку, а саме, з'ясувати, які фактори найбільше впливають на туризм населення. Одним з найбільш продуктивних рішень проблем, які виникають в області управління й організації, полягає у застосуванні когнітивного управління. Основою когнітивного управління є когнітивний аналіз, когнітивні моделі, когнітивне моделювання, когнітивна система.

Сутність когнітивного управління полягає в тому, щоби допомогти аналітикам розробити найбільш ефективну стратегію управління нестабільною і слабоструктурованою середою, спираючись на свій досвід і знання про об'єкт управління [107, 108].

Технологія когнітивного моделювання полягає в тому, щоб на її основі визначити можливі і раціональні шляхи управління ситуацією, діяти на випередження і не доводити потенційно небезпечні ситуації до конфліктних, а в разі виникнення – прийняти раціональне рішення в інтересах економічних суб'єктів [109].

Застосування когнітивного підходу у дослідженні системи туризм дозволить вирішити два вида завдань: статистичні і динамічні.

Мета когнітивного моделювання полягає в генерації і перевірці гіпотез про діяльність функціональних структур, спостерігаються ситуації, які здатні пояснити поведінку спостережуваної системи.

Когнітивний аналіз складається з кількох етапів, на кожному з яких реалізується певна задача. Послідовне вирішення цих завдань призводить до досягнення головної мети когнітивного аналізу.

Серед багатьох вихідних базисних факторів виділяється сукупність так званих керуючих факторів – вхідних факторів когнітивної моделі, через які керуючі фактори впливають на модель. Вплив керуючих факторів вважається узгодженим з метою, якщо він не викликає небажаних змін ні в якому з цільових факторів.

При дослідженні системи було виокремлено одинадцять основних факторів (рис. 3.1), що впливають на туризм. В якості основних факторів розглядаються найбільш значущі для об'єкта дослідження фактори та їх роль у причинно-наслідкових зв'язках.

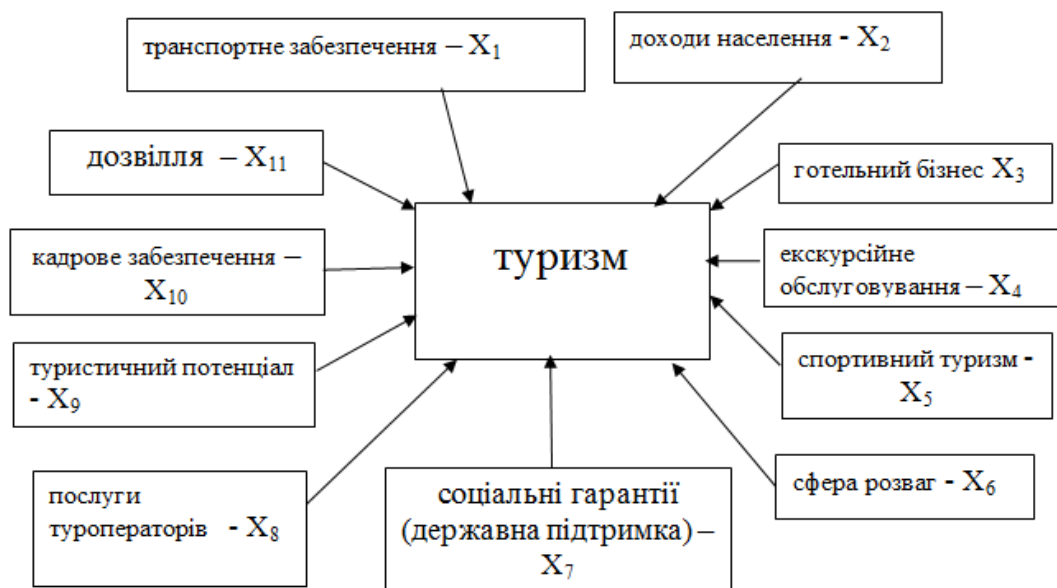


Рис. 3.1. Фактори системи – туризм

На основі визначених факторів був проведений когнітивний аналіз моделі покращання туризму, який полягав у дослідженні залежності системи, дослідженні причинно-наслідкових шляхів та поширенні збурень у моделі [110].

Когнітивна карта є однією з розповсюджених когнітивних моделей. Вона застосовується при когнітивному моделюванні складних ситуацій. Когнітивна карта – це вид математичної моделі, яка наводиться у вигляді графа і дозволяє описувати суб'єктивне сприйняття особою або групою людей будь-якого складного об'єкту, проблеми або функціонування системи [108]. Вона

призначена для виявлення структури зв'язків між елементами системи, складного об'єкту і оцінки наслідків, що відбуваються під впливом дії на ці елементи або зміни характеру зав'язків.

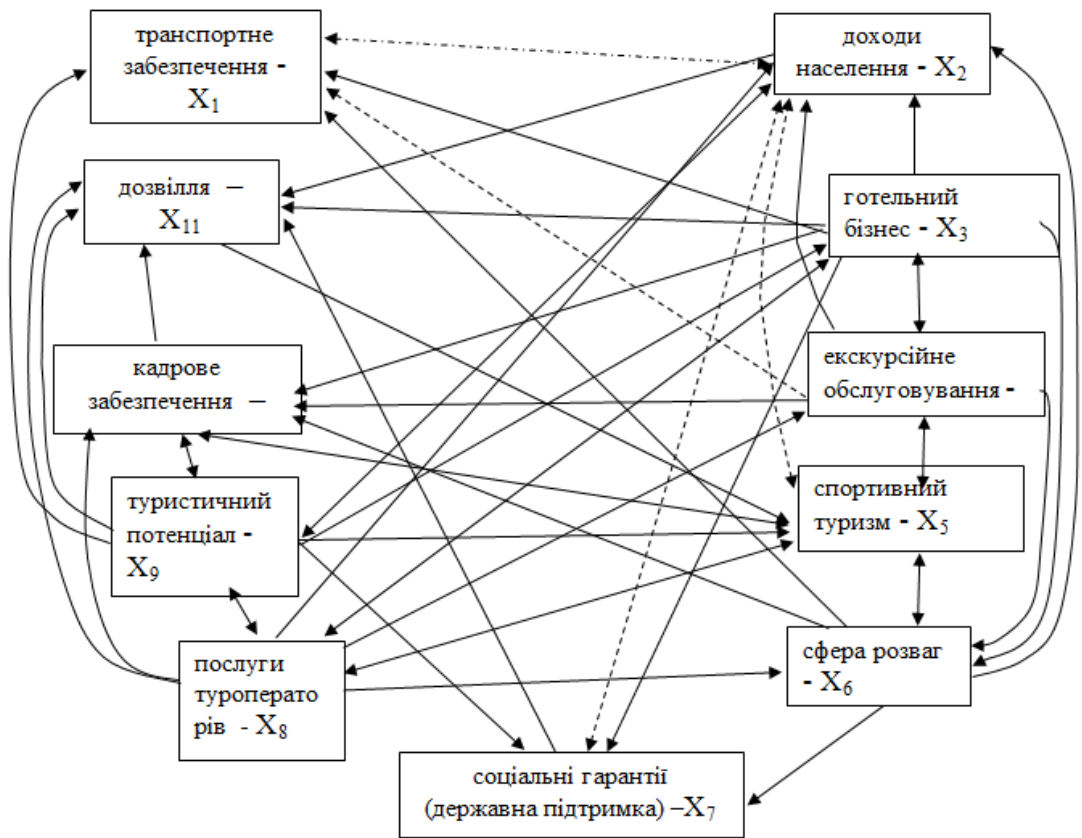


Рис. 3.2. Когнітивна карта напрямків взаємозв'язків системи туризм

Когнітивна карта і сценарний підхід при аналізі системи дає можливість визначити вплив зовнішнього і внутрішнього середовища на ефективність формування і використання ресурсів для туризму, дозволяє виявити, які параметри потребують прискореного розвитку і вимагають зміни.

Розглянуті в системі чинники можна поділити на фактори впливу зовнішнього і внутрішнього середовища.

Когнітивна модель системи туризм надана у вигляді графа:

$$G = (V, E), V = \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_8, x_9, x_{10}, x_{11}, \},$$

де  $V$  – безліч вершин графа, відповідних зовнішніх і внутрішніх чинників,

$E$  – безліч дуг, що відображають факт безпосереднього впливу параметрів один на одного, де:

- +1 – зростання (падіння) фактора  $X_i$ , спричиняє зростання (падіння)  $X_j$ ;
- 1 – зростання (падіння) фактора  $X_i$ , тягне падіння (зростання)  $X_j$ ;
- 0 – зв’язок між факторами  $X_i$  і  $X_j$  відсутня або слабка.

На підставі карти напрямків взаємозв’язків системи туризм (рис. 3.2) складена когнітивна матриця  $A$  взаємозв’язків параметрів, де при позитивному зв’язку збільшення значення фактора-причини призводить до збільшення значення фактора-наслідка, а при негативному зв’язку значення фактора-причини призводить до зменшення значення фактора-слідства [111].

Матриця  $A$  взаємозв’язків параметрів, представлені матрицею суміжності системи – туризм:

$$A := \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{array}{c|cccccccccc} & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ \hline 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & -1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 2 & -1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & -1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 5 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 7 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 8 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 9 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 10 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \end{array}$$

Для визначення позитивного і негативного впливу факторів використовували матриці прискорення (для всіх стимулюючих) і гальмування (для всіх гальмуючих взаємодій чинників) для всіх взаємодій [112, 113].

Фактори, які більше піддаються впливу з боку системи туризм:  $X_1$  – безпека життєдіяльності,  $X_7$  – соціальні гарантії (державна підтримка),  $X_8$  – послуги туроператорів,  $X_9$  – туристичний потенціал.

В таблиці 3.1 проведений аналіз впливу факторів на систему-туризм.

Прискорюють систему туризм чинники за наступним ранжируванням:  $X_{10}$ ,  $X_2$ ,  $X_4$ ,  $X_7$ ,  $X_8$ ,  $X_6$ ,  $X_5$ . При цьому сильна активність проявляється у чинників  $X_9$ ,  $X_3$ ,  $X_{12}$ ,  $X_8$ ,  $X_4$ ,  $X_6$ ,  $X_7$ .

Таблиця 3.1 Аналіз впливу факторів на систему туризм

Фактор	Стимулювання	Гальмування	Інтерпретація фактору
X <sub>1</sub> – транспортне забезпечення	Сильно взаємодіє, активний.	Слабко взаємодіє, активний	Зміна фактора доходи населення є <b>цільовим фактором</b> . Фактор має високу ступінь взаємодії і потрапляє під вплив інших факторів.
X <sub>2</sub> – доходи населення	Сильний рівень взаємодії, пасивний	Сильна взаємодія, пасивний	Зміна фактора доходи населення є <b>цільовим фактором</b> управління системою. Фактор має високу ступінь взаємодії і потрапляє під вплив інших факторів.
X <sub>3</sub> – готельний бізнес	Сильно взаємодіє, активний	Слабка взаємодія, пасивний	Фактор активно впливає на систему, що робить його ідеальним <b>важелем</b> управління системою.
X <sub>4</sub> – екскурсійне обслуговування	Середній рівень взаємодії, активний	Середній рівень взаємодії, середня активність	Активність фактора в матриці гальмування значно нижче, ніж у матриці прискорення, що робить його ідеальним <b>важелем</b> управління системою.
X <sub>5</sub> – спортивний туризм	Слабка взаємодія пасивний	Слабка взаємодія пасивний	Фактор слабо впливає на зміну системи, в даний час він пасивний. Фактор може бути використаний як індикатор.
X <sub>6</sub> – сфера розваг	Слабка взаємодія активний	Слабка взаємодія активний	Фактор слабо впливає на зміну системи, в даний час він пасивний.. Фактор може бути використаний як <b>індикатор</b> .
X <sub>7</sub> – соціальні гарантії (державна підтримка)	Сильно взаємодіє, активний,	Середній рівень взаємодії, активний	Фактор може бути використаний як <b>важіль</b> управління станом. Чим сильнішою є державна підтримка, тем вищою є туризм
X <sub>8</sub> – послуги туроператорів	Сильно взаємодіє, активний	Середній рівень взаємодії, активний	Фактор не залежить від зміни системи, сам же активно впливає на неї, що робить його ідеальним <b>важелем управління</b> системою.
X <sub>9</sub> – туристичний потенціал	Слабко взаємодіє, активний	Слабко взаємодіє, активний	Фактор може бути використаний, як <b>індикатор</b> .
X <sub>10</sub> – кадрове забезпечення	Сильний рівень взаємодії, пасивний	Сильний рівень взаємодії, середня активність	Фактор має високу ступінь взаємодії з системою і підпадає під вплив інших елементів системи. Зміна фактора є <b>цільовим</b> в управлінні системою..
X <sub>11</sub> – дозвілля	Слабко взаємодіє, і пасивний	Слабко взаємодіє і пасивний	Фактор слабо діє на зміну системи, зараз він пасивний. Фактор може бути використаний, як <b>індикатор</b> .

З усіх факторів на підставі результатів аналізу чутливості виділені:

1. Цільові фактори – зміна або стабілізація яких є метою управління системою туризм;

2. Фактори важелі управління-керуючі фактори, потенційно впливають на систему туризм;

3. Фактори індикатори – відображають і пояснюють розвиток процесу у проблемній ситуації.

Фактори, які активно впливають на систему, можна представити за їх впливу (рис. 3.3).

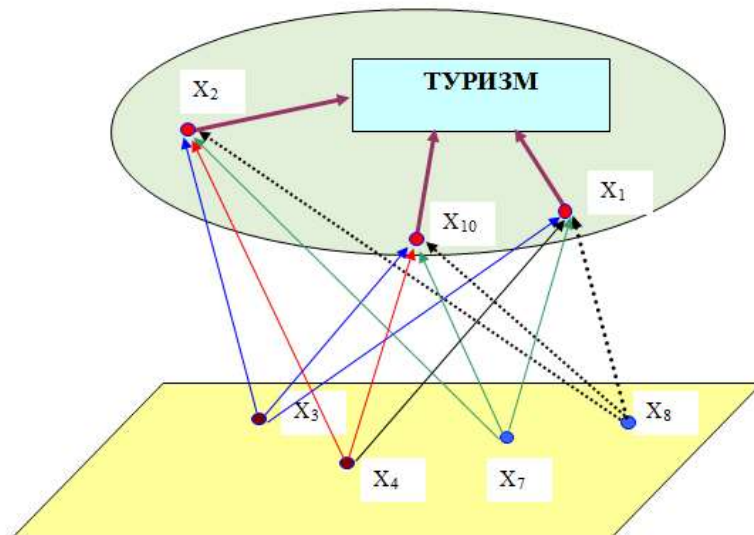


Рис. 3.3. Схема впливу основних факторів системи продуктивність праці

Таким чином фактори системи туризм можна розбити на групи: до цільових факторів належать: X1 – транспортне забезпечення, X2 – доходи населення, X10 – кадрове забезпечення.

Фактори-важелі системи туризм (керуючі) – це потенційно можливі важелі впливу на ситуацію: X3 – готельний бізнес, X4 – екскурсійне обслуговування, X7 – соціальні гарантії (державна підтримка), X8 – послуги туроператорів.

Для отримання сценаріїв нами розглянуті процеси поширення збурень на графі G за певним маршрутом M. Моделювання імпульсних процесів (3.1) дасть можливість побудувати сценарії.

Величина імпульсу в вершині  $x_i$  в момент  $t$  описується функцією:

$$U_i(t+1) = U_i(t) + \sum_{j=1}^n F(V_j, V_i) p_j(t) \quad (3.1)$$

де  $p_j(t)$  - вектор зміни значень параметрів вершин зваженого неорієнтованого графа на відповідному такті моделювання,  $t$  – такти (кроки) моделювання  $t = 0, 1, 2, 3, \dots, n$ , що відображають послідовність змін станів системи якості життя;  $U_i(t)$  – значення параметрів вершин на такті моделювання;  $U_i(t+1)$  и  $U_i(t)$  - значення  $i$ -го фактору на такті моделювання  $t+1$  та  $t$ , відповідно,  $n = 1 \div 12$ ,  $F(V_j, V_i)$  - вплив фактору  $x_j$  на  $x_i$ .  $j \in n$ ,  $n$  – кількість факторів, які безпосередньо впливають на фактор  $x_i$ .  $p_j(t)$  в залежності від знака дуги, що з'єднує  $x_i$  і  $x_j$  та дорівнює 1 [114, 108].

Отримаємо результати моделювання імпульсного процесу відповідного сценарію внесення збурень на визначені важелі.

Під активними вершинами розуміють фактори – потенційні важелі впливу на систему:

$X_1$  – транспортне забезпечення,

$X_3$  – готельний бізнес,

$X_4$  – екскурсійне обслуговування,

$X_7$  – соціальні гарантії (державна підтримка),

$X_8$  – послуги туроператорів.

Так, при активному впливі фактора  $X_1$  – транспортне забезпечення, відбувається збільшення значень за всіма факторами після першого такту в кілька разів, виняток становить фактор  $X_2$  – доходи населення знижуються, їх зростання відбувається лише після третього такту, після чого вони значно збільшуються (в 10 разів), це можна пояснити впровадженням різних реформ.

Для цільових факторів зміни в системі при обуренні  $q_0 = +1$  в вершину  $X_4$  (екскурсійне обслуговування) – збільшення показників після першого такту.

При позитивному обуренні  $q_0 = +1$  в вершину  $X_7$  (соціальні гарантії) всі цільові фактори збільшують свої значення при першому такті моделювання

(рис. 3.4).

Однак, після третього такту відбувається значне зниження показників по кожному фактору. Це пояснюється тим, що надані соціальні гарантії впливають на зростання туризму, однак без додаткового впливу інших факторів відбувається значний спад показників.

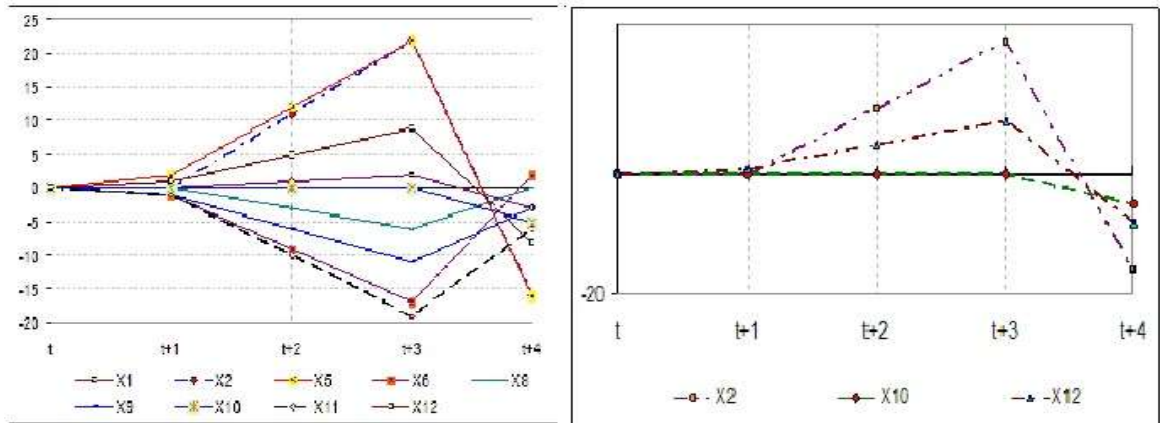


Рис. 3.4. Графік внесення обурень  $q = +1$  у вершину  $X_7$  (соціальні гарантії)

При позитивному обуренні  $q_0 = +1$  в вершину  $X_7$  (соціальні гарантії) всі цільові фактори збільшують свої значення при першому такті моделювання.

При позитивному обуренні  $q_0 = +1$  в вершину  $X_8$  (послуги туроператорів) всі фактори після третього такту значно збільшують свої значення (рис. 3.5).

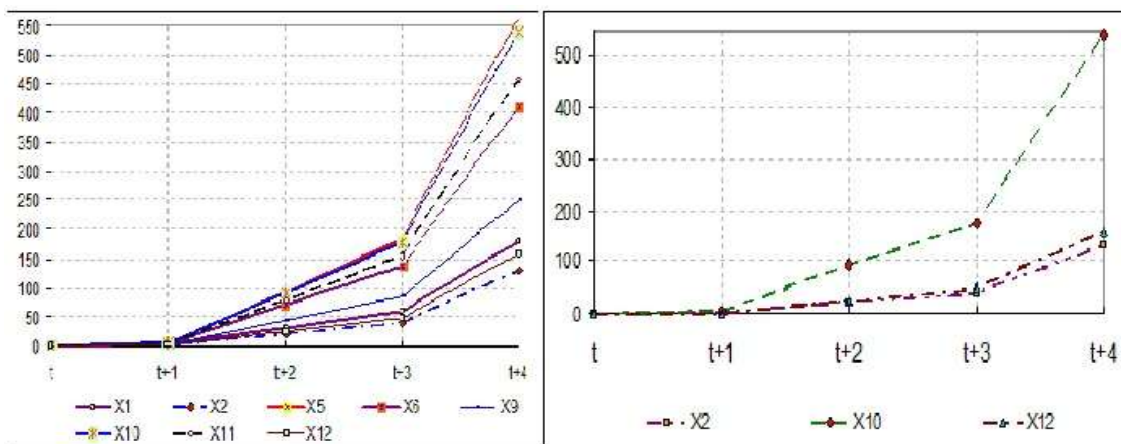


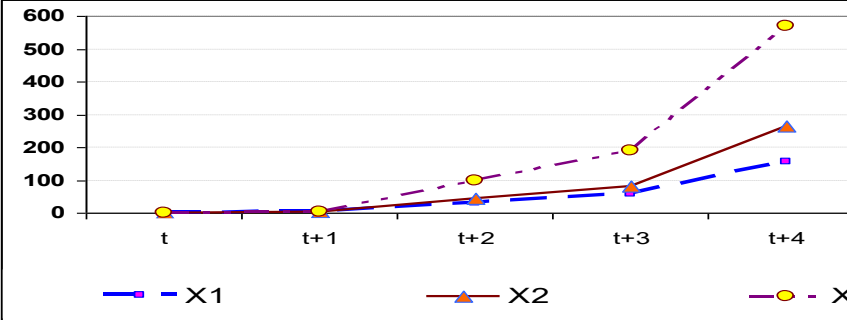
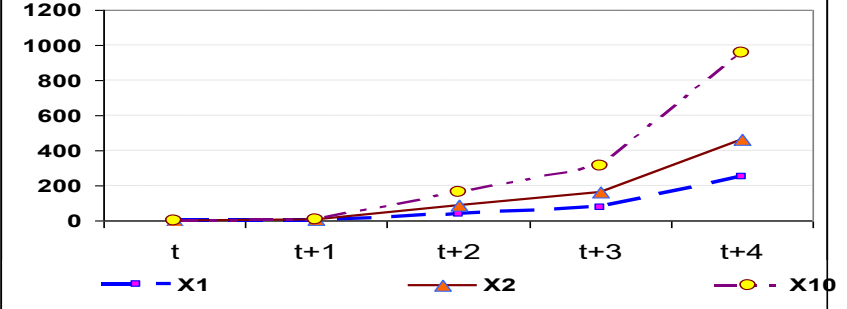
Рис. 3.5. Графік внесення обурень  $q = +1$  у вершину  $X_8$  (послуги туроператорів)

Добробут будь-якого туризму залежить, в першу чергу, від послуг туроператорів, тому покращання послуг туроператорів необхідно як на державному, так і на регіональному рівнях.

При позитивному обуренні  $q_0 = +1$  в вершину  $X_8$  (послуги туроператорів) всі цільові фактори збільшують свої значення при першому такті моделювання. Показники у цьому сценарії істотно відрізняються від показників в інших сценаріях.

З метою обмеження безлічі можливих планів експерименту впливу в вершинах орієнтованого графа був розглянутий такий план експерименту, який відображає існуючі і можливі впливи на чинники досліджуваної системи (табл. 3.2).

Таблиця 3.2. Підсумки сценарного моделювання системи туризм

<p><b>Сценарій 1.</b> Покращуються:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- готельний бізнес</li> <li>- екскурсійне обслуговування</li> </ul> <p><math>X_3</math> – готельний бізнес, <math>X_4</math> – екскурсійне обслуговування, <math>X_7</math> – соціальні гарантії (державна підтримка), <math>X_8</math> – послуги туроператорів.</p>	 <p><b>Висновок:</b> Дуже гарне поєднання чинників. На відміну від попередніх сценаріїв збільшення за всіма показниками в 3 рази більше з 2 такту. При такому поєднанні факторів не потрібна державна підтримка.</p>
<p><b>Сценарій 2.</b> Покращуються:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- соціальні гарантії (державна підтримка),</li> <li>- послуги туроператорів.</li> </ul>	 <p><b>Висновок:</b> На відміну від попередніх сценаріїв збільшення за всіма показниками ще більше з 2 такту. При такому поєднанні факторів потрібна державна підтримка.</p>

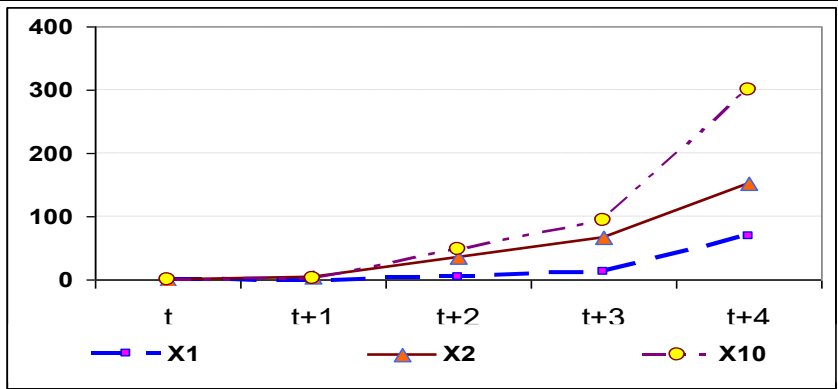
**Сценарій 3.**

Погіршуються:

- готельний бізнес
- екскурсійне обслуговування

Покращуються:

- соціальні гарантії (державна підтримка),
- послуги туроператорів.



- погіршення готельного бізнесу і екскурсійного обслуговування

- призводить до зменшення за всіма показниками в 2 рази. Зростання державної підтримки і послуг туроператорів не покращує становища. Можна відзначити, що фактори екскурсійне обслуговування та готельний бізнес є з основних важелів для системи - туризм.

Таким чином, можна зробити висновок, що з розглянутих факторів найбільш активними є важелі, які позитивно впливають на цільові фактори:

$X_3$  – готельний бізнес,

$X_4$  – екскурсійне обслуговування,

$X_7$  – соціальні гарантії (державна підтримка),

$X_8$  – послуги туроператорів.

Розглянуті сценарії дозволяють зробити висновок, що основними факторами, які впливають на зміни в системі туризм є:

$X_3$  – готельний бізнес,

$X_4$  – екскурсійне обслуговування.

Погіршення показників одного з них призводить до негативних наслідків в системі і, навпаки, поліпшення – суттєво збільшує показники інших цільових факторів системи.

Когнітивне моделювання в системі туризм дозволяє описати його структуру, взаємодію і взаємовплив його складових, причинно-наслідкові взаємозв'язки між ними; різні процеси, що протікають у ньому, їх взаємодію із зовнішнім середовищем, виявити вплив зовнішнього середовища на поточну ситуацію, прогнозувати величини факторів, і вже на цій основі обґрунтувати необхідні управлінські дії для вирішення проблем, що виникають у системі.

### 3.2. Багаточастотні системи із запізненнями

#### Усереднення в багаточастотних системах із запізненням і нелокальними умовами

**Вступ.** Різноманітні коливні системи, які в процесі еволюції проходять через резонанси, описуються диференціальними рівняннями вигляду [115, 116]

$$\frac{da}{d\tau} = X(\tau, a, \varphi), \quad \frac{d\varphi}{d\tau} = \frac{\omega(\tau, a)}{\varepsilon} + Y(\tau, a, \varphi), \quad (3.1)$$

де  $a \in D \subset R^n$ ,  $\varphi \in R^m$ ,  $m \geq 2$ ,  $\omega$  – вектор частот, малий параметр  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ ,  $\tau = \varepsilon t$ ; вектор-функції  $X$  і  $Y$   $2\pi$  – періодичні за змінними  $\varphi_v$ ,  $v = \overline{1, m}$ .

Ефективним методом побудови розв'язку і таких систем є метод усереднення за швидкими змінними  $\varphi_v$ , у результаті чого системі (3.1) відповідає простіша система

$$\frac{d\bar{a}}{d\tau} = X_0(\tau, \bar{a}), \quad \frac{d\bar{\varphi}}{d\tau} = \frac{\omega(\tau, \bar{a})}{\varepsilon} + Y_0(\tau, \bar{a}). \quad (3.2)$$

В усередненій системі вектор повільних змінних  $\bar{a}(\tau)$  знаходяться незалежно від  $\bar{\varphi}$ , а швидких змінних  $\bar{\varphi}(\tau, \varepsilon)$  – одержується інтегруванням, якщо відомо  $\bar{y} = \bar{\varphi}(0; \varepsilon)$ .

У монографії [116] обґрунтування методу усереднення для систем вигляду (3.1) із початковими, багатоточковими та інтегральними умовами здійснено на підставі оцінок відповідних осциляційних інтегралів. Такий підхід застосовано і для багаточастотних систем із запізненням аргументу у працях [117-119]. Системи рівнянь з інтегральними умовами досліджуються, наприклад у [118-120, 115].

**Постановка задачі.** У даній праці розглянено  $m$ -частотну систему диференціальних рівнянь із лінійно перетвореними аргументами вигляду

$$\frac{da}{d\tau} = X(\tau, a_\Lambda, \varphi_\Theta), \quad (3.3)$$

$$\frac{da}{d\tau} = X(\tau, a_\Lambda, \varphi_\Theta), \quad (3.4)$$

де  $\tau \in [0, L]$ , малий параметр  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ ,  $\varphi_{\theta_j}(\tau) = \varphi(\theta_j \tau)$ ,  $\Lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_p)$ ,  $0 < \lambda_1 < \dots < \lambda_p \leq 1$ ,  $a_{\lambda_i}(\tau) = a(\lambda_i \tau)$ ,  $\Theta = (\theta_1, \dots, \theta_q)$ ,  $0 < \theta_1 < \dots < \theta_q \leq 1$ . Вектор-функції  $X$ ,  $Y$  і  $\omega$  достатньо гладкі за всіма аргументами при  $\tau \in [0, L]$ ,  $a \in D$ ,  $D$  – обмежена замкнена опукла область в  $\mathbb{R}^n$ ,  $\varphi \in \mathbb{R}^m$ ,  $m \geq 1$ ,  $2\pi$ -періодичні за змінними  $\varphi_{\theta_j}$ .

Для системи рівнянь (3.3), (3.4) задано умови

$$\sum_{v=1}^r \alpha_v a(t_v) = f\left(\int_0^L A(\tau) a(\tau) d\tau\right), \quad (3.5)$$

$$\sum_{v=1}^r \beta_v \varphi(t_v) = g\left(\int_0^L h(\tau, a_\Lambda(\tau), \varphi_\Theta(\tau)) d\tau\right), \quad (3.6)$$

Усереднена задача за швидкими змінними як ситема рівнянь, так і умови набувають вигляду

$$\frac{d\bar{a}}{d\tau} = X_0(\tau, \bar{a}_\Lambda), \quad (3.7)$$

$$\frac{d\bar{\varphi}}{d\tau} = \frac{\omega(\tau)}{\varepsilon} + Y_0(\tau, \bar{a}_\Lambda), \quad (3.8)$$

$$\sum_{v=1}^r \alpha_v \bar{a}(t_v) = f\left(\int_0^L A(\tau) \bar{a}(\tau) d\tau\right), \quad (3.9)$$

$$\sum_{v=1}^r \beta_v \bar{\varphi}(t_v) = g\left(\int_0^L h_0(\tau, a_\Lambda) d\tau\right). \quad (3.10)$$

Усереднена задача простіша, ніж точна, оскільки окремо розв'язується задача (3.7), (3.9). Якщо розв'язок  $\bar{a} = \bar{a}(\tau; \bar{y})$ ,  $\bar{y} = \bar{a}(0; \bar{y})$ ,  $\tau \in [0, L]$ , знайдено, то розв'язок  $\bar{\varphi} = \bar{\varphi}(\tau; \bar{y}, \bar{\psi}, \varepsilon)$ ,  $\bar{\psi} = \bar{\varphi}(0; \bar{y}, \bar{\psi}, \varepsilon)$  знаходимо шляхом інтегрування рівняння (3.8). Задача полягає у встановленні достатніх умов

існування та єдиності розв'язку задачі (3.3)–(3.6) й отримання оцінки відхилення розв'язків точної й усередненої систем задач, залежної від параметра  $\varepsilon$ .

Нехай  $V(\tau)$  – визначник Вронського порядку  $m q$ , побудований за системою функцій  $\{\omega(\theta_1 \tau), \dots, \omega(\theta_q \tau)\}$ ,  $\bar{z} := \int_0^L A(\tau) \frac{\partial \bar{a}(\tau; \bar{y})}{\partial \bar{y}} d\tau$ ,

$$P(\bar{y}) := \sum_{\nu=1}^r \alpha_{\nu} \frac{\partial \bar{a}(t_{\nu}; \bar{y})}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial f(\bar{z})}{\partial \bar{z}} \int_0^L A(\tau) \frac{\partial \bar{a}(\tau; \bar{y})}{\partial \bar{y}} d\tau.$$

**Терема.** Нехай виконуються умови:

- 1)  $(X, Y) \in C_{\tau, a_{\lambda}, \phi_{\theta}}^{2, 2, m q + 2}(G, \sigma_1)$ ,  $G = [0, L] \times D^p \times R^{m q}$ ;
- 2)  $\omega \in C^{m q - 1}[0, L]$ ;
- 3) визначник Вронського  $V(\tau)$  відмінний від нуля на  $[0, L]$ ;
- 4) існує єдиний розв'язок усередненої задачі (3.7)–(3.9) і компонента  $\bar{a}(\tau; \bar{y})$  належить області  $D$  із деяким  $\rho$ -околом;
- 5) матриця  $P(\bar{y})$  невироджена і  $\sum_{\nu=1}^q \beta_{\nu} \neq 0$ ;
- 6) елементи матриці  $A_{ij} \in C[0, L]$ ,  $f, g \in C^2(G_1)$ .

Тоді для досить малого  $\varepsilon_0 > 0$  для кожного  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$  існує єдиний неперервно диференційований розв'язок  $(a(\tau, \bar{y} + \mu, \bar{\psi} + \xi, \varepsilon), \phi(\tau, \bar{y} + \mu, \bar{\psi} + \xi, \varepsilon))$  задачі (3.3)–(3.6) виконується оцінка  $\|a(\tau; \bar{y} + \mu, \bar{\psi} + \zeta, \varepsilon) - \bar{a}(\tau; \bar{y})\| + \|\phi(\tau; \bar{y} + \mu, \bar{\psi} + \zeta, \varepsilon) - \bar{\phi}(\tau; \bar{y}, \bar{\psi}, \varepsilon)\| \leq c_1 \varepsilon^{\alpha}$  для всіх  $(\tau, \varepsilon) \in [0, L] \times (0, \varepsilon_0]$ , водночас

$$\|\mu(\varepsilon)\| \leq c_2 \varepsilon^{\alpha}, \quad \|\zeta(\varepsilon)\| \leq c_3 \varepsilon^{\alpha},$$

де  $\alpha = (m q)^{-1}$ , додатні сталі  $c_1, c_2, c_3$  не залежать від  $\varepsilon$ .

Умова 3 забезпечує вихід із малого околу резонансу, умова якого в точці  $\tau \in [0, 1]$  визначена в [117] і набуває вигляду

$$\sum_{\nu=1}^a \theta_{\nu}(k_{\nu}, \varpi(\theta_{\nu} \tau)) = 0, k_{\nu} \in Z^m, \max \|k_{\nu}\| \neq 0.$$

Доведення теореми ґрунтується на оцінці відхилення розв'язків систем рівнянь (3.3), (3.4) і (3.7), (3.8) із початковими умовами, які збігаються в точці  $\tau = 0$  [117]. На підставі принципу стискаючих відображень доведено існування і єдиність початкових умов  $(\bar{y} + \mu(\varepsilon), \bar{\psi} + \xi(\varepsilon))$  для розв'язку системи рівнянь (3.3), (3.4), який задовольняє умови (3.5), (3.6).

Застосування одержаного результату розглянуто на контрольному прикладі Понтрягіна [121] із параметрами керування  $u$  і  $v$ :

$$\begin{aligned} \ddot{x} + \alpha \dot{x} &= \rho u + \varepsilon X(\tau, \varphi_{\Theta}), \\ \ddot{y} + \beta \dot{y} &= \sigma v + \varepsilon Y(\tau, \varphi_{\Theta}), \\ \dot{\varphi} &= \omega(\tau) + \varepsilon Z(\tau, \varphi_{\Theta}). \end{aligned} \quad (3.11)$$

де  $\varphi \in R^m, m \geq 1$ , малий параметр  $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0]$ , вектор-функції  $X, Y$  і  $Z$   $2\pi$ -періодичні за компонентами векторів швидких змінних  $\varphi_{\Theta}, v = \overline{1, m}$ .

Заміною змінних  $z_1 = x - y, z_2 = \dot{x}, z_3 = \dot{y}$  система рівнянь зводиться до системи вигляду

$$\begin{aligned} \dot{z}_1 &= z_2 - z_3, \\ \dot{z}_2 &= \rho u - \alpha z_2 + \varepsilon X(\tau, \varphi_{\Theta}), \\ \dot{z}_3 &= \sigma v - \beta z_3 + \varepsilon Y(\tau, \varphi_{\Theta}), \\ \dot{\varphi} &= \omega(\tau) + \varepsilon Z(\tau, \varphi_{\Theta}). \end{aligned}$$

До одержаної системи застосовується метод усереднення. Процес переслідування завершений, якщо  $x(T) = y(T), T > 0$ .

### **Дослідження умов існування оптимальних керувань для детермінованих та стохастичних систем диференціальних рівнянь**

Розглядається задача оптимального керування на скіченному часовому інтервалі наступною системою диференціальних рівнянь:

$$\begin{cases} \dot{x} = f_1(t, x) + f_2(t, x)u(t), \\ x(0) = x_0, \end{cases} \quad (3.12)$$

з критерієм якості

$$J(u) = \int_0^{\tau} L(t, x(t), u(t)) dt \rightarrow \inf, \quad (3.13)$$

на відрізку  $t \in [0, T]$ , де  $x_0 \in D$  - фіксований вектор,  $x \in D$  - фазовий вектор,  $D$  - деяка область в  $\mathbb{R}^d$ ,  $\partial D$  - її межа,  $\bar{D} = D \cup \partial D$ ,  $\tau$  - момент першого виходу розв'язку  $x(t)$  на границю області  $D$ ,  $u \in U \subset \mathbb{R}^m$  - вектор керування,  $U$  - опукла, замкнена множина і  $0 \in U$ .

Керування  $u(t)$  вважаються допустимими, якщо:

- a1)  $u(t) \in L_p([0, T])$ ,
- a2)  $u(t) \in U$ , при  $t \in [0, T]$ .

Множину допустимих керувань позначатимемо через  $V$ .

Відносно системи (3.12) вважаємо виконаними наступні умови:

A) вектор-функція  $f_1(t, x): [0, T] \times \bar{D} \rightarrow \mathbb{R}^d$  та матриця  $f_2(t, x): [0, T] \times \bar{D} \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^m$  - неперервні за сукупністю змінних функції;

B) для функцій  $f_1(t, x)$  та  $f_2(t, x)$  виконується наступна умова: існує така стала  $C > 0$ , що для будь-яких  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$

$$\begin{aligned} |f_1(t, x)| &\leq C(1 + |x|), \\ \|f_2(t, x)\| &\leq C(1 + |x|). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Тут  $|\cdot|$  - норма вектора в  $\mathbb{R}^d$ ,  $\|\cdot\|$  - норма матриці, узгоджена з нормою вектора.

Функції  $L(t, x, u)$ ,  $L_x(t, x, u)$  та  $L_u(t, x, u)$  є неперервними за змінними  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$  та  $u \in U$  і задовольняють наступні умови:

- 1) існують такі сталі  $k > 0$  та  $p > 1$ , що виконується нерівність

$$L(t, x, u) \geq k|u|^p, \quad (3.15)$$

для  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$ ,  $u \in U$ .

- 2) існує стала  $K > 0$  та  $\alpha > 0$ , що

$$|l_x(t, x, u)| + |L_u(t, x, u)| \leq K(1 + |u|^{p-1} + |x|^\alpha) \quad (3.16)$$

для  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$ ,  $u \in U$ .

- 3)  $L(t, x, u)$  опукла по  $u$  для будь-яких фіксованих  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$ .

Має місце наступна теорема про достатні умови існування оптимального керування даною системою.

**Теорема 1.** Нехай для системи (3.12) з критерієм якості (3.13), виконуються умови А), В) та 1)-3). Тоді задача (3.12), (3.13) має розв'язок в класі допустимих керувань  $V$ , тобто існує оптимальне керування  $u^*(t)$ , що мінімізує критерій якості (3.13).

Далі розглядається випадок, коли замість умови лінійного росту (3.13) для функцій  $f_1(t, x)$  та  $f_2(t, x)$  виконується наступна умова: для деякого  $\alpha > 0$

$$\begin{aligned} |f_1(t, x)| &\leq C(1 + |x|^\alpha) \\ ||f_2(t, x)|| &\leq C(1 + |x|^\alpha) \end{aligned} \quad (3.17)$$

Відзначимо, що при  $\alpha > 1$  дана умова допускає вихід розв'язку задачі Коші (3.12) на нескінченність за скінченний час (вибух). Однак, використовуючи Теорему 1, можна отримати достатні умови оптимальності і в цьому випадку. Має місце наслідок.

**Наслідок.** Якщо в задачі оптимального керування (3.12), (3.13) виконуються умови А), (3.17), а для функції  $L(t, x, u)$  виконуються умови Теорему 1 із заміною умов 1) та 2) на умови

1') існують такі сталі  $k > 0$ ,  $\alpha > 0$  та  $p > 1$ , що виконується нерівність

$$L(t, x, u) \geq k(|u|^p + |x|^{\alpha q}), \quad (3.18)$$

для  $t \in [0, T]$ ,  $x \in \bar{D}$ ,  $u \in U$ , де  $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$ .

2') існує стала  $K > 0$ , що

$$|L_x(t, x, u)| + |L_u(t, x, u)| \leq K(1 + |u|^{p-1} + |x|^{\alpha(q-1)}). \quad (3.19)$$

Крім того, нехай існує хоча б одне таке допустиме керування  $u_1(t)$ , що

$$\int_0^{\tau_1} L(t, x_1, u_1) dt < \infty, \quad (3.20)$$

де  $x_1$  розв'язок (3.12), що відповідає керуванню  $u_1$ .

Тоді задача (3.12), (3.13) має розв'язок в класі допустимих керувань  $V$ .

Ми також розглядаємо задачу відшукування достатніх умов існування оптимального керування стохастичними системами диференціальних рівнянь в термінах коефіцієнтів вихідної задачі, а саме розглянуто керовану систему стохастичних диференціальних рівнянь

$$\begin{cases} \dot{x} = A(t, x(t), u(t, x))dt + B(t, x(t), u(t, x))dW(t), \\ x(0) = x_0, \end{cases} \quad (3.21)$$

з критерієм якості

$$J(u) = \int_0^T C(t, x(t), u(t, x))dt \rightarrow \inf, \quad (3.22)$$

де  $W(t)$  - стандартний  $r$  - вимірний вінерівський процес з незалежними компонентами, визначений на деякому ймовірнісному просторі  $(\Omega, F, P)$  при  $t \geq 0, u(t, x): [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow U, U$  - деяка множина із  $\mathbb{R}^m$ .

Для функцій, що входять в систему рівнянь виконуються наступні умови:

(А) вектор-функція  $A(t, x, u): [0, T] \times \mathbb{R}^d \times U \rightarrow \mathbb{R}^d$ , і матриця  $B(t, x, u): [0, T] \times \mathbb{R}^d \times U \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^r$  - неперервні за сукупністю змінних;

(В) для функцій  $A(t, x, u)$  та  $B(t, x, u)$  виконується умова лінійного росту, тобто існує константа  $K$ , що для будь-яких  $t \in [0, T], x \in \mathbb{R}^d$  та  $u \in U$ :

$$\begin{aligned} |A(t, x, u)| &\leq K(1 + |x| + |u|), \\ ||B(t, x, u)|| &\leq K(1 + |x| + |u|), \end{aligned} \quad (3.23)$$

Функція  $C(t, x, u)$  вважається неперервною за сукупністю змінних, невід'ємною і задовольняє наступну умову

$$|C(t, x, u)| \leq K_1(1 + |x| + |u|)^n, \quad (3.24)$$

для деякого  $n \geq 1$  и  $K_1 > 0$ .

Надалі розв'язок задачі Коші (3.21) розуміється в слабкому сенсі, а саме в сенсі наступного означення.

**Означення 1.** Якщо існує такий ймовірнісний простір  $(\Omega, F, \mathbb{P})$  із заданою фільтрацією  $\{F_t\}, t \geq 0$  на якому можна визначити процес броунівського руху  $W(t)$  для  $t \in [0, T]$  і неперервний, випадковий процес

$\{x(t), t \in [0, T]\}$ , які узгоджені з фільтрацією  $\{F_t\}$  так, що з ймовірністю 1 має місце рівність

$$x(t) = x_0 + \int_0^t A(s, x(s), u(s, x)) ds + \int_0^t B(s, x(s), u(s, x)) dW(s),$$

то даний процес будемо називати слабким розв'язком рівняння (3.21).

Визначимо множину допустимих керувань  $u = u(t, x)$  з оберненим зв'язком.

**Означення 2.** Допустимими керуваннями будемо вважати такі функції  $u(t, x): [0, T] \times \mathbb{R}^d \rightarrow U$ , що

1) для кожного керування  $u(t, x)$  рівняння (3.12) з початковою умовою  $x(0) = x_0$  має слабкий розв'язок;

2) функція  $u(t, x)$  задовольняє умови лінійного по  $x$  росту: тобто  $\exists N > 0$ : що для будь-якого  $t \in [0, T]$  і  $x \in \mathbb{R}^d$  виконується нерівність

$$|u(t, x)| \leq N(1 + |x|), \quad (3.25)$$

3) функція  $u(t, x)$  задовольняє за своїми змінними локальну умову Лівшица, тобто для будь-якого  $R > 0$  існує додатна константа  $K_R$  (яка залежить від  $R$ ), що для будь-яких  $t_1, t_2 \in [0, T]$  та  $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^d, |x_1| \leq R, |x_2| \leq R$ :

$$|u(t_1, x_1) - u(t_2, x_2)| \leq K_R(|t_1 - t_2| + |x_1 - x_2|)$$

Множину керувань, для яких виконуються умови 1)-3) назвемо допустимою для задачі (3.21), (3.22) і будемо позначати її через  $V$ .

Допустиме керування  $u^*(t, x)$  будемо вважати оптимальним, а відповідний йому розв'язок (3.12)  $x^*(t)$  - оптимальним розв'язком, якщо пара  $(u^*(t, x), x^*(t))$  реалізує критерій якості (3.22).

Нашою метою є доведення існування оптимального керування системою (3.21) з критерієм якості (3.22) при виконанні вище перерахованих умов.

Має місце наступна теорема.

**Теорема 2.** Нехай в системі (3.21) з критерієм якості (3.22), для функцій  $u(t, x), A(t, x, u), B(t, x, u)$  та  $C(t, x, u)$  виконуються умови (3.23) і (3.24). Тоді

задача (3.21), (3.22) має розв'язок в класі допустимих керувань  $V$ , тобто існує допустиме керування  $u^*(t, x)$ , що мінімізує критерій якості (3.22).

### **3.3. Контактна механіка поверхонь**

*Актуальність та постановка проблеми.* У машинобудівних конструкціях контактуючі елементи часто включають деталі, що взаємодіють на номінально співпадаючих або майже однакових поверхнях чи лініях. Наприклад, штампи, прес-форми, зубчасті зачеплення, приводи тощо. Збіг форми поверхонь контактуючих деталей прагнуть досягти для зниження контактного тиску. Варіант із номінально збіжними поверхнями не є оптимальним через відхилення форми реальних деталей від проєктної (похибки при механообробці, нерівномірні деформації при термообробці, похибки при збиранні тощо). Тоді ключовим фактором в цьому випадку стають властивості матеріалів поверхневих шарів та покриттів. Тому важливим є моделювання наявності та податливості поверхневих шарів та покриттів. Це завдання є актуальним і складає напрямок досліджень, описаних у цій роботі.

*Основні матеріали дослідження.* Проведений аналіз методів дослідження контактної взаємодії елементів конструкцій з урахуванням додаткових чинників [122–127] вказав на необхідність розробки вдосконалених моделей контактної взаємодії елементів конструкцій, які враховують властивості матеріалів поверхневих шарів та збурення номінально конгруентних контактуючих поверхонь. Це дозволить вивчати закономірності напружено-деформованого стану контактуючих тіл за різних умов. Для цього необхідно розробити математичну модель, параметричні чисельні моделі напружено-деформованого стану контактуючих тіл із поверхнями близької форми для визначення закономірностей впливу властивостей матеріалів поверхневих шарів та покриттів і збурення форми поверхонь контактуючих тіл та на їхній напружено-деформований стан. При розв'язанні задачі про

контактну взаємодію тіл, яка не підпадає під традиційні моделі (рис. 3.6) можна розглядати варіації форм поверхонь  $S_1$  та  $S_2$ , а також контактних жорсткостей  $c_1$  та  $c_2$ .

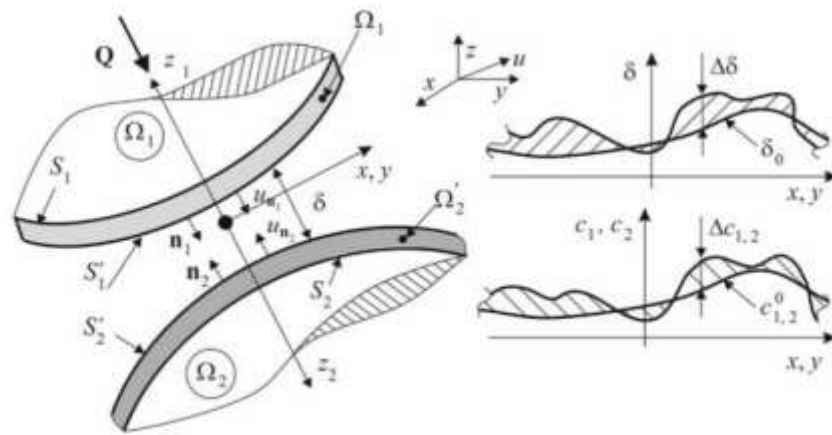


Рис. 3.6. Контакт тіл  $\Omega_1, \Omega_2$  за наявності проміжних шарів (покриттів)  $\Omega'_1, \Omega'_2$  відповідно

Це призводить до збурень номінальних розподілів зазору  $\delta_0, c_1^0$  і  $c_2^0$ :

$$\delta(x, y) = \delta_0(x, y) + \Delta\delta(x, y), \quad (1.1)$$

$$c_1(x, y) = c_1^0(x, y) + \Delta c_1(x, y); \quad c_2(x, y) = c_2^0(x, y) + \Delta c_2(x, y). \quad (1.2)$$

Таким чином, можна встановлювати залежності розв'язків задач контактної взаємодії від змін форми контактуючих тіл та контактної жорсткості поверхневих шарів. Розроблена параметрична модель продемонструвала працездатність і можливість одержання повної інформації про напружено-деформований стан системи контактуючих тіл при варіюванні збурення номінальної форми тіл та властивостей їхніх поверхневих шарів. Для вирішення завдання залучалися методи теорії обробки металів тиском, теорії пружності, теорії варіаційних нерівностей, метод скінченних елементів [128], теорія тривимірного геометричного параметричного твердотільного і поверхневого моделювання. Числові розрахунки проводилися із залученням комп'ютерних систем ANSYS та SolidWorks. Наведено деякі приклади

результатів досліджень напружено-деформованого стану досліджуваної системи тіл «пуансон – заготовка – матриця» (рис. 3.7-3.10).

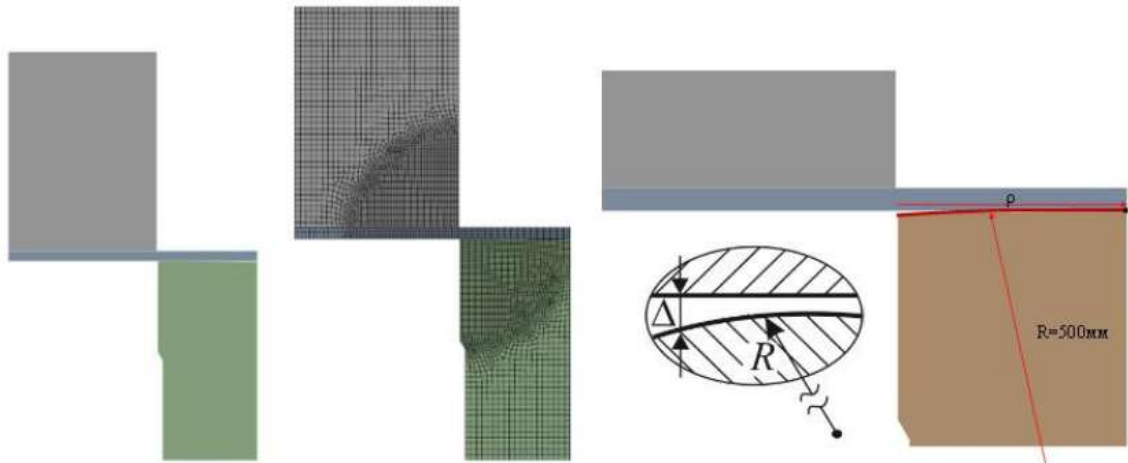


Рис. 3.7. Геометрична та скінченно-елементна моделі досліджуваної системи тіл «пуансон – заготовка – матриця»

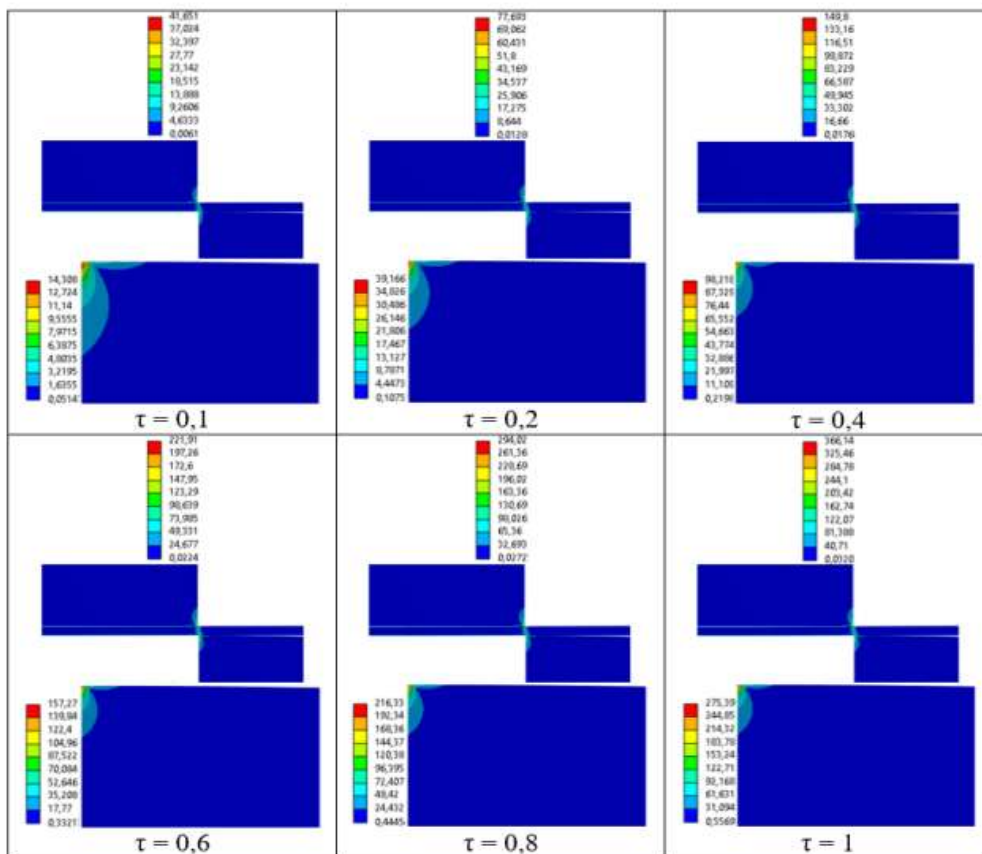


Рис. 3.8. Розподіли еквівалентних напружень за Мізесом, МПа, при  $\rho=0.4$  мм;  $C=10^{15}$  Н/м

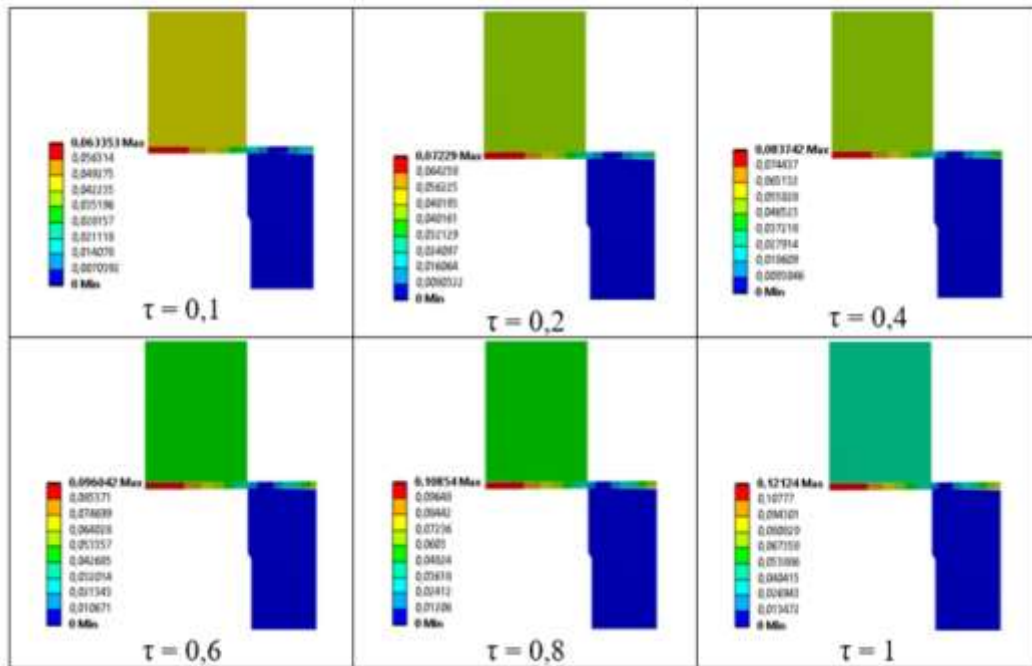


Рис. 3.9. Розподіли повних переміщень, мм ( $10^{-3}$  м) при  $\rho=0.4$  мм;  
 $c=10^{11}$  Н/м

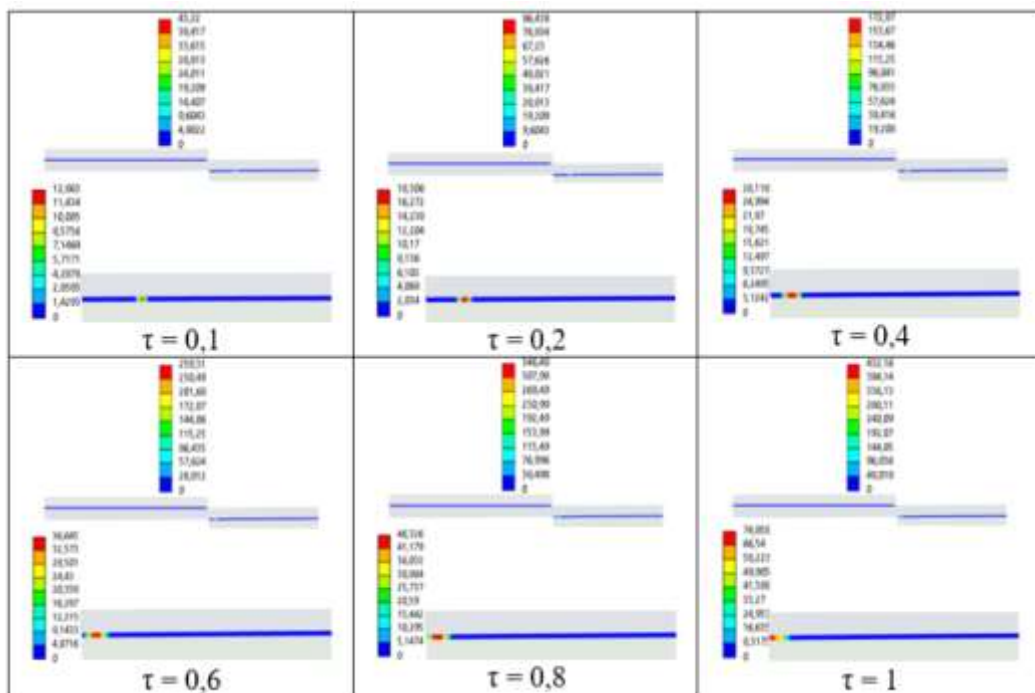


Рис. 3.10. Розподіли контактної тиску, МПа, при  $\rho=5$  мм;  $C=10^{15}$  Н/м

Аналіз отриманих розподілів і параметричних залежностей від варійованих параметрів показує, що при номінально співпадаючих поверхнях і нульовій контактній жорсткості зона контакту не змінюється зі зростанням навантаження, а контактний тиск і компоненти напружено-деформованого

стану прямо пропорційні величині навантаження. Ця закономірність також зберігається при співпадаючих поверхнях і ненульовій контактній податливості, але зі зменшенням контактної жорсткості зона контакту збільшується, тоді як контактний тиск і компоненти напружено-деформованого стану знижуються. Коли ж форма спряжених поверхонь зазнає збурень, пряма пропорційність контактного тиску та компонент напружено-деформованого стану до рівня навантаження порушується. Однак тенденція до збільшення зони контакту та зниження рівня контактного тиску і компонент напружено-деформованого стану залишається.

### **Висновки до третього розділу**

У межах досліджень з моделювання процесів та систем виконано комплексний аналіз різномірних динамічних, соціально-економічних та інженерних об'єктів, що дало змогу сформуванати універсальні підходи до опису, оптимізації та прогнозування їх поведінки. Розроблені когнітивні моделі управління дозволили формалізувати взаємозв'язки між факторами складних соціально-економічних систем і оцінювати наслідки управлінських рішень у ситуаціях із високою невизначеністю. Дослідження багаточастотних систем із запізненнями забезпечили отримання умов існування та єдності розв'язків, а також оцінок похибок методів усереднення, що є важливим для аналізу та керування нелінійними динамічними процесами.

Моделювання контактної механіки поверхонь дало змогу встановити закономірності впливу форми, жорсткості та властивостей поверхневих шарів на напружено-деформований стан контактуючих тіл, що є ключовим для оптимізації інженерних конструкцій та підвищення їх надійності. Сукупність отриманих результатів демонструє ефективність застосування математичних і комп'ютерних методів для дослідження різних типів систем та підтверджує можливість їх практичного використання для прийняття рішень, оптимізації процесів і підвищення ефективності складних об'єктів.

## РОЗДІЛ IV. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗВ'ЯЗАННЯ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ ЗА ДОПОМОГОЮ СТРУКТУРОВАНИХ ДИСКРЕТНИХ МОДЕЛЕЙ

*Постановка проблеми.* На сьогоднішній день в інженерних додатках одне із провідних місць займають дослідження, які виконуються із застосуванням комп'ютерного моделювання різноманітних реальних процесів, оскільки комп'ютерне моделювання за своїми витратами в багато разів економічно вигідніше ніж побудова фізичної моделі. Сучасні проекти мають все більш складний характер, оскільки використовують моделі, які складається з досить великої кількості компонентів і зв'язків між ними. Математичне моделювання процесів у таких конструкціях має певні труднощі, пов'язані зі складністю геометричної форми відповідних областей.

Дискретною моделлю геометричного об'єкту (сіткою) називають множину точок, що розподілені в досліджуваній області, разом зі зв'язками між цими точками. Дискретна модель геометричного об'єкта замінює вихідну неперервну область скінченною множиною простих фігур [129]. В залежності від розмірності простору дискретні моделі складаються з різних типів елементів: одновимірні (відрізки, дуги кривих); двовимірні (трикутники, чотирикутники); тривимірні (тетраедри, призми, шестигранники).

Розрізняють структуровані та неструктуровані сітки (рис. 4.1). Неструктуровані сітки визначаються звичайним набором вузлів. Логічний зв'язок між вузлами сітки визначається довільним чином, тобто кожен вузол може мати довільну кількість «сусідів». На відміну від неструктурованої сітки в структурованій всі внутрішні вершини топологічно еквівалентні між собою. Наприклад, чотирикутні структуровані сітки топологічно еквівалентні стандартним прямокутним сіткам.

Структурована сітка відрізняється від неструктурованої тим, що вона:

- накладає обмеження на форму елементів, структуру їхнього розміщення і на геометричну модель;
- потребує витратити більше часу людини-розробника, але менше часу розрахунку обчислювальної техніки;
- розрахунковий алгоритм не змінюється при подальшому подрібненні сітки, змінюється лише крок сітки.

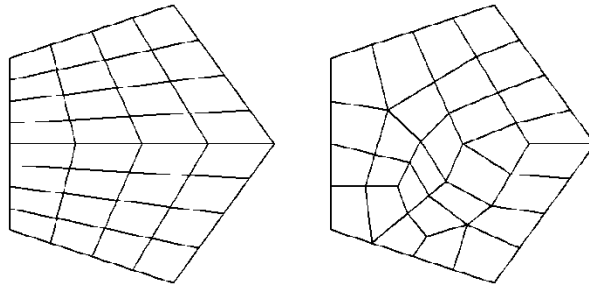


Рис. 4.1. Структурована (ліворуч) і неструктурована (праворуч) сітки

Огляд актуальних підходів і методів автоматичної генерації неструктурованих сіток (дискретних моделей геометричних об'єктів), зокрема, аналіз методів генерації дискретних моделей з використанням трикутних або тетраедричних елементів, а також чотирикутних або шестигранних скінченних елементів, наведено в роботі [130].

Загальна послідовність кроків, необхідних для генерації структурованих дискретних моделей геометричних об'єктів така:

1. Геометрія області, яка буде дискретизована, повинна бути визначена, тобто границя області повинна бути описана. Подання геометрії може бути виконано різними шляхами: аналітична форма (сфери, циліндри), сплайни, NURBS (неоднорідні раціональні b-сплайни), методи інтерполяції. Геометрія може бути побудована в системі автоматизованого проектування (САПР) або в системі генерації сіток. Багато САПР використовують аналітичні форми і не дуже добре підходять для створення сіток з потоком, що є проблемним для аналітичного запису, тому багато пакетів генерації сіток забезпечують певний рівень підтримки САПР.

2. Аналіз меж геометричного об'єкта з метою встановлення відповідності між геометричними особливостями (наприклад, зламами) та межовими вузлами структурованої сітки. Для розв'язання цієї задачі з урахуванням подання поверхні, часто її необхідно переорієнтувати. Далі для генерації сітки потрібно отримати параметрично гладкі поверхні, щоб точки сітки плавно змінювались по поверхні. Для отримання гладкої поверхні найчастіше використовуються САПР, які гарантують лише геометричну гладкість, але часто не є параметрично гладкими. Параметризація згладжування поверхні зазвичай включає розв'язок еліптичного рівняння на поверхні. Зауважимо, що при побудові декартової сітки цей крок не потрібен.

3. Генерація сітки об'єму. Ця процедура істотно відрізняється для різних типів сітки.

Для генерації структурованих сіток використовують різні спеціальні програмні засоби: ANSYS [131], OpenFOAM [132], SPGrid [111], HybMesh [133] тощо.

Генерація структурованих сіток розробляється на основі різних рівнянь і теорій, а саме: еліптичні рівняння [111, 134, 135]; параболічні рівняння; рівняння еластодинаміки [136]; рівняння Нав'є-Стокса [137-139]; триангуляція [140, 141]; теорія R-функцій [Помилка! Джерело посилання не знайдено.140]; крива, поверхня, об'єм, екстракція Безьє [Помилка! Джерело посилання не знайдено.142]; функції Гріна [143].

Розглянемо квазілінійне (лінійне відносно старших похідних) диференціальне рівняння в частинних похідних другого порядку вигляду

$$a_{11}(x, y)u_{xx} + 2a_{12}(x, y)u_{xy} + a_{22}(x, y)u_{yy} = f(x, y, u, u_x, u_y), \quad (4.1)$$

де  $a_{ij}(x, y)$ ,  $i, j = 1, 2$ , неперервні функції в деякій області  $G$ .

Розглянемо звичайне диференціальне рівняння

$$a_{11}(dy)^2 - 2a_{12}dxdy + a_{22}(dx)^2 = 0, \quad (4.2)$$

яке називається характеристичним для рівняння (4.1), а його інтеграли – характеристиками.

З курсу звичайних диференціальних рівнянь відомо: якщо  $z = \varphi(x, y)$  – деякий розв’язок рівняння (4.3), тобто,

$$a_{11}z_x^2 + 2a_{12}z_xz_y + a_{22}z_y^2 = 0, \quad (4.3)$$

тоді співвідношення  $C = \varphi(x, y)$  є загальним інтегралом рівняння (4.2). Має силу і обернене твердження.

Нехай  $a_{11} \neq 0$  ( $a_{22} \neq 0$ ). Тоді із (4.2) маємо:

$$\frac{dy}{dx} = \frac{a_{12} \pm \sqrt{\Delta}}{a_{11}}, \quad \left( \frac{dx}{dy} = \frac{a_{12} \pm \sqrt{\Delta}}{a_{22}} \right),$$

де  $\Delta = a_{12}^2 - a_{11}a_{22}$ .

Рівняння (4.1) в області  $\mathbf{D} \subset \mathbf{G}$  називається рівнянням

а) *гіперболічного типу*, якщо дискримінант  $\Delta > 0$  для всіх  $(x, y) \in \mathbf{D}$ , канонічні форми якого можна записати у вигляді

$$U_{\xi\eta} = \frac{F(\xi, \eta, U, U_\xi, U_\eta)}{2\alpha_{12}}, \quad \alpha_{12} \neq 0,$$

або

$$\bar{U}_{\alpha\alpha} - \bar{U}_{\beta\beta} = F_1(\alpha, \beta, \bar{U}, \bar{U}_\alpha, \bar{U}_\beta) .$$

б) *параболічного типу*, якщо  $\Delta = 0$  при  $(x, y) \in \mathbf{D}$ , канонічні форми якого можна записати у вигляді

$$U_{\eta\eta} = \frac{F(\xi, \eta, U, U_\xi, U_\eta)}{\alpha_{22}}, \quad \alpha_{22} \neq 0.$$

в) *еліптичного типу*, якщо  $\Delta < 0$  при  $(x, y) \in \mathbf{D}$ , канонічні форми якого можна записати у вигляді

$$U_{\xi\xi} + U_{\eta\eta} = \frac{F(\xi, \eta, U, U_\xi, U_\eta)}{\alpha_{11}}, \quad \alpha_{11} \neq 0.$$

У випадку лінійних рівнянь другого порядку зі сталими коефіцієнтами одержуємо наступні канонічні форми:

$$V_{\xi\xi} + V_{\eta\eta} + \gamma V = g(\xi, \eta) \text{ – еліптичний тип;}$$

$$V_{\eta\eta} + b_1 V_\xi = g(\xi, \eta) \text{ – параболічний тип;}$$

$$\left. \begin{aligned} V_{\xi\eta} + \gamma V &= g(\xi, \eta) \\ V_{\xi\xi} - V_{\eta\eta} + \gamma V &= g(\xi, \eta) \end{aligned} \right\} - \text{гіперболічний тип.}$$

Наведемо деякі приклади побудови структурованої сітки аеродинамічної форми НАСА0012 крила літака, що розроблені за допомогою Національного консультативного комітету з аеронавтики (НАСА), а параметри в числовому коді можуть бути введені в рівняння для точної генерації поперечного перерізу профілю і обчислення його властивостей.

Розглянемо просту зв'язану обмежену область  $D$  в двовимірному просторі з декартовими координатами  $\bar{x} = (x, y)^T$ , що розділена на чотири області [144].

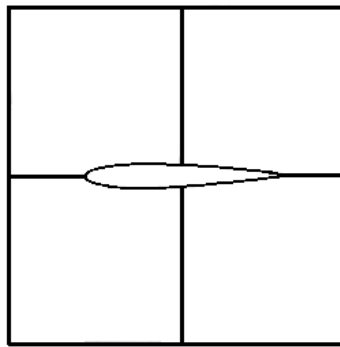


Рис. 4.2. Область  $D$  поблизу аеродинамічної форми НАСА0012.

В узагальненому вигляді маємо рівняння Пуассона для генерації структурованої сітки

$$\begin{aligned} a_{22}\bar{x}_{\xi\xi} - 2a_{12}\bar{x}_{\xi\eta} + a_{11}\bar{x}_{\eta\eta} + (a_{22}P_{11}^1 - 2a_{12}P_{12}^1 + a_{11}P_{22}^1)\bar{x}_{\xi} \\ + (a_{22}P_{11}^2 - 2a_{12}P_{12}^2 + a_{11}P_{22}^2)\bar{x}_{\eta} = 0, \end{aligned}$$

де 6 коефіцієнтів  $P_{jk}^i$  називаються контрольним функціями.

Найпростіший приклад генерації сітки, що має назву лапласової сітки (рис. 4.3) [144], отримаємо за умови, якщо всі 6 контрольних функцій дорівнюють нулю, тобто

$$P_{jk}^i = 0,$$

тоді маємо наступний вигляд рівняння Пуассона

$$a_{22}\bar{x}_{\xi\xi} - 2a_{12}\bar{x}_{\xi\eta} + a_{11}\bar{x}_{\eta\eta} = 0.$$

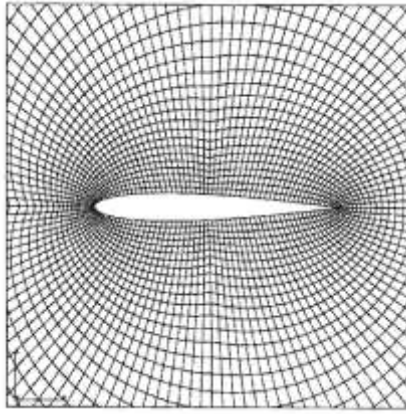


Рис. 4.3. Лапласова сітка.

Припустимо, що точки граничної сітки задані на чотирьох краях  $E_1$ ,  $E_2$ ,  $E_3$ ,  $E_4$  області  $D$ , тоді сітка всередині цієї області може бути побудована на основі нормованої довжини дуги (рис. 4.4) [144]. Отже, маємо 2 алгебраїчних рівняння для генерації сітки:

$$s = s_{E_3}^a(\xi)(1 - t) + s_{E_4}^a(\xi)t$$

$$t = t_{E_1}^a(\eta)(1 - s) + t_{E_2}^a(\eta)s$$

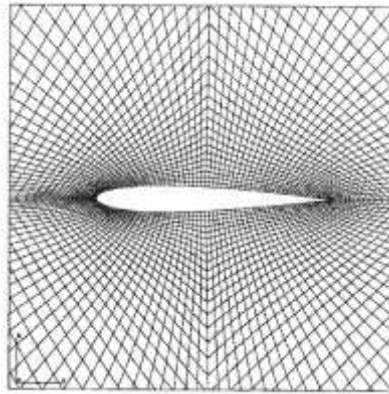


Рис. 4.4. Сітка на основі довжини дуги.

Якщо накласти граничні умови Діріхле-Неймана, то можна згенерувати сітку всередині області  $D$ , яка буде ортогональна всім чотирьом краям області  $D$ . В цьому випадку для генерації сітки (рис. 4.5) [144] маємо рівняння

$$s = s_{E_3}^0(\xi)H_0(t) + s_{E_4}^0(\xi)H_1(t)$$

$$t = t_{E_1}^0(\eta)H_0(s) + t_{E_2}^0(\eta)H_1(s),$$

де верхній індекс 0 вказує на вимогу ортогональності, а  $H_0$  та  $H_1$  – кубічні функції інтерполяції Ерміта, що визначаються як

$$H_0(s) = (1 + 2s)(1 - s)^2 \quad H_1(s) = (3 - 2s)s^2 \quad 0 \leq s \leq 1$$

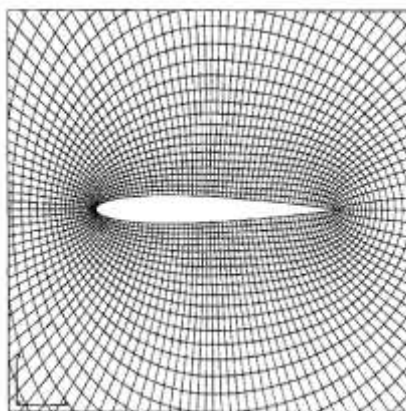


Рис. 4.5. Сітка з граничною ортогональністю.

Гранична ортогональність робить сітку гладкою по внутрішній межі області.

Різні типи диференціальних рівнянь в частинних похідних другого порядку можуть асоціюватися з різноманітними типами гідромеханічних задач. Наприклад, задачі, що містять залежність від часу, зводяться до параболічних або гіперболічних рівнянь. Параболічними рівняннями визначаються течії, що мають дисипацію, наприклад, течії, для яких істотною є в'язкість або теплопровідність, в цьому випадку розв'язок буде гладким, а градієнти із плином часу зменшуватимуться, якщо граничні умови не залежать від часу.

Якщо дисипаційні механізми відсутні, для лінійних диференціальних рівнянь в частинних похідних розв'язок зберігає сталу амплітуду, а для нелінійних – амплітуда розв'язку може навіть зростати, таким розв'язком характеризуються гіперболічні диференціальні рівняння в частинних похідних. Еліптичні диференціальні рівняння в частинних похідних зазвичай визначають задачі, що описують врівноважений або сталий стан течії. Але деякі сталі процеси також можна описати параболічними (примежовий шар) або гіперболічними рівняннями (нев'язка надзвукова течія) [145].

Найпростіше генерувати декартову сітку, оскільки область покривається прямокутною сіткою. Границі області можуть не охоплюватися границями сітки, але адаптивне виправлення може бути використано для покращення поверхні. Отже, необхідне уточнення сітки в двох напрямках для двовимірного випадку, але для тривимірного випадку достатньо установити сітку в напрямленні, що перпендикулярно границі. Найчастіше структуровані сітки будують як прямокутні шахові декартові сітки.

В блочно-структурованому методі обчислювальна область розділяється на набір прямокутних блоків, що не перекривають один одного. Далі сітка генерується на кожному блоці окремо. Згладжування на блоках виконується до досягнення певного ступеня неперервності на межі блоків. Розриви у відстані між сітками на межі блоків можуть ускладнити розв'язування.

Найбільш розповсюджені методи генерації сіток відносяться до наступних категорій: алгебраїчні, еліптичні і варіаційні, гіперболічні.

Алгебраїчні методи створюють сітки для внутрішньої області і комбінують алгебраїчне представлення границі. Для трансфінитної інтерполяції використовуються поліноми. Алгебраїчні методи не настільки гнучкі, як інші методи, але генерація цими методами є простою і швидкою.

Еліптичні методи генерації можуть обробляти більш загальні випадки. Вони можуть використовуватися для створення високоякісних сіток, які будуть мати бажану гладкість, на доволі складних областях. Розв'язок рівняння Пуассона визначає місцеположення точок сітки. Варіаційний метод також дає еліптичне рівняння, розв'язок якого визначає місцеположення точок сітки. Важливим є вибір функцій управління, які визначають відстань між точками сітки та ортогональність сітки [111, 134].

Гіперболічні методи розв'язують гіперболічну систему рівнянь для генерації сітки від границі області. Зазвичай, накладається умова ортогональності ліній сітки. Зазвичай додається згладжування, щоб позбутися передчасного накладання ліній сітки. Зовнішня границя сітки визначається

розв'язком рівняння, тому цей метод обмежений для використання в блочно-структурованих сітках, але дуже корисний при покритті сіток.

Під час генерації блочно-структурованої сітки спочатку створюються окремі складові сітки для різних частин геометрії, використовуючи алгебраїчний, еліптичний чи гіперболічний методи. Враховуючи набір складових сіток, визначається, як зробити покриття автоматичним, але може виникнути збій, якщо при покритті не будуть міцними зв'язки між компонентами різних блоків.

Використання методу скінчених різниць для розв'язку диференціальних рівнянь було одним із перших підходів для отримання дискретного представлення тіла. В його основі лежить ідея трансформації сітки, що визначена на одиничному кубі, у потрібну геометрію кубоподібного тіла. Якщо тіло має складну форму, то цю проблему можна розв'язати методами декомпозиції чи блочної декомпозиції, які засновані на ідеї декомпозиції тіла на кубоподібні блоки.

Чисельні методи, що використовуються при генерації структурованих сіток: метод скінчених різниць; метод скінчених елементів; метод скінченого об'єму; метод спектральних елементів; метод FDTD.

На практиці застосування генерації структурованих сіток використовується для моделювання широкого кола об'єктів і процесів:

- моделювання об'єктів, матеріалів, деформацій, тріщин;
- моделювання аеродинаміки, гідродинаміки, потоків різного походження;
- моделювання задач теплопровідності;
- моделювання хвиль різної природи;
- моделювання магнітостатичної задачі, оцінка електромагнітного поля;
- оцінка щільності імпульсу електрона (EMD), його моментів і пов'язаної з ним інформаційної ентропії Шеннона для багатоелектронної молекулярної системи;

- дослідження зварювання тертям (FSW);
- дослідження в циклонному дизайні падіння тиску;
- співставлення базисного представлення змінної поля над областю в контексті чисельного моделювання і зворотних задач, де неперервне скалярне або векторне поле над областю може бути представлено в різних скінчено вимірних базисних наближеннях, таких як неструктурований базис для чисельного розв'язку прямої задачі і регулярна сітка для представлення розв'язку зворотної задачі.

### **Висновки до четвертого розділу**

Проведено огляд сучасного стану генерації структурованих дискретних моделей, який є продовженням і доповненням попередніх досліджень. Дослідження методів генерації структурованих сіток виявило переваги та недоліки їхнього використання. Популярною є комбінація генерації структурованих та неструктурованих сіток, яка дозволяє використати всі переваги і обмежити недоліки обох видів сіток.

Проведений огляд підтверджує актуальність розробки методів генерації структурованих дискретних моделей геометричних об'єктів для подальшого чисельного аналізу їх властивостей.

## ВИСНОВКИ

У межах науково-дослідної програми виконано повний комплекс теоретичних, чисельних та прикладних досліджень, спрямованих на розвиток сучасних методів моделювання у фізиці, енергетиці, інженерії та суміжних галузях. Отримані результати охоплюють широкий спектр задач – від моделювання квантових систем і оптимізації фотоелектричних перетворювачів до аналізу багаточастотних динамічних систем, контактної механіки та біохімічних процесів.

Розроблені математичні та комп'ютерні моделі дозволили встановити закономірності поведінки складних об'єктів, визначити ключові параметри, що впливають на їх ефективність, та запропонувати шляхи оптимізації конструкцій і технологічних процесів. Значну увагу приділено моделюванню гетероструктурних сонячних елементів, що забезпечило отримання високих значень ефективності та підтвердило перспективність використання поруватих напівпровідників, оксидних плівок і антивідбивних покриттів.

Дослідження процесів управління, динамічних систем із запізненнями та контактної взаємодії поверхонь сприяли формуванню універсальних підходів до аналізу та прогнозування поведінки складних систем різної природи. Міждисциплінарні результати, зокрема вивчення фенольних сполук у рослинній сировині, розширили прикладний потенціал програми та продемонстрували можливість застосування методів моделювання у біотехнологічних дослідженнях.

Загалом виконання програми забезпечило досягнення поставленої мети, підтвердило актуальність обраних напрямів і створило наукове підґрунтя для подальших досліджень у галузі математичного, комп'ютерного та інженерного моделювання. Отримані результати мають практичне значення для енергетики, машинобудування, матеріалознавства, біотехнологій та освітньої діяльності, що свідчить про успішну реалізацію програми та її внесок у розвиток сучасних наукових підходів.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Heindel T., Portalupi S. L., Reitzenstein S. Quantum dots for photonic quantum information technology. *Advances in Optics and Photonics*. 2023. Vol. 15, No. 3. P. 763–842.
2. Gevorkyan G. S., Sarkisyan H. A., Kazaryan E. M., Tshantshapanyan A. A. Magnetic Absorption and Photoluminescence in a Cylindrical Quantum Dot with a Modified Pöschl–Teller Potential. *Journal of Contemporary Physics*. 2021. Vol. 56, No. 3. P. 310–318.
3. Mkrtchyan M. A., Hayrapetyan D. B., Kazaryan E. M., Sarkisyan H. A. Optical parameters of coupled vertical cylindrical quantum dots with double modified Pöschl–Teller potential. *Proceedings of SPIE*. 2020. Vol. 11456. P. 114560M.
4. Kasapoglu E., Yücel M. B., Sakiroglu S., Sari H., & Duque C. A. Optical Properties of Cylindrical Quantum Dots with Hyperbolic-Type Axial Potential under Applied Electric Field. *Nanomaterials*. 2022. V. 12(19). P. 3367.
5. Dvovyan K. G., Kazaryan E. M., & Petrosyan L. S. Electronic states in quantum dots with ellipsoidal symmetry. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2005. V. 28(4). Pp. 333-338.
6. Efros A. L., Rosen M. Electronic states in spherical quantum dots. *Annual Review of Materials Science*. 2000. Vol. 30. P. 475–521.
7. Sapiro S., Sarma D. D. Electronic structure of core–shell quantum dots. *Physical Review B*. 2004. Vol. 69. P. 125304.
8. Banyai L., Koch S. W. *Semiconductor Quantum Dots*. Berlin: Springer, 1993. 300 p.
9. Lozovski V., Piatnytsia V. (2013). The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*. Vol. 8, № 11, November 2011. P. 2335-2343(9)

10. Kazaryan E. M., Petrosyan L. S., Shahnazaryan V. A., Sarkisyan H. A. Quasi-conical quantum dot: electron states and quantum transitions. *Communications in Theoretical Physics*. 2015, Vol. 63, № 2. P. 255-260. DOI:10.1088/0253-6102/63/2/20

11. Hayrapetyan D. B., Chalyan A. V., Kazaryan E. M., Sarkisyan H. A. Direct Interband Light Absorption in Conical Quantum Dot. *Journal of Nanomaterials*. 2015, Article ID 915742, 6 p. DOI:10.1155/2015/915742

12. Eduard M. K., Lyudvig S. P., Vanik A. S., & Hayk A. S. Quasi-conical quantum dot: electron states and quantum transitions. *Communications in Theoretical Physics*. 2015. V. 63(2). P. 255.

13. Халанчук Л.В., Чопоров С.В. Огляд методів генерації дискретних моделей геометричних об'єктів *Вісник Запорізького національного університету: Збірник наукових статей. Фізико-математичні науки*. 2018. №1. С. 139-152.

14. Сосницька Н.Л., Морозов М.В., Онищенко Г.О., Халанчук Л.В. Моделювання кванторозмірних гетеросистем та методичне забезпечення курсу «Фізичні основи інформаційних технологій». *Науковий вісник Львівської академії: Серія: Педагогічні науки. Збірник наукових праць*. 2019. Вип.5. С. 415-421. DOI 10.33251/2522-1477-2019-5-415-421

15. Abdullah C. A. C., Razak D. F. A., Yunus M. B. M., Zaki M., & Yusoff M. Structural and Optical Properties of N-Type and P-Type Porous Silicon Produced at Different Etching Time. *Int. J. Electroactive Mater.* 2019. V. 7. Pp. 28-37.

16. Timokhov D. F., & Timokhov F. P. Determination of structure parameters of porous silicon by the photoelectric method. *J. Phys. Studies*. 2004. V. 8(2). Pp. 173-177.

17. Karbassian F. Porous silicon. In *Porosity-Process, Technologies and Applications*. 2018. IntechOpen.

18. Karachevtseva L. A., Lytvynenko O. A., Malovichko E. A., Sobolev V. D., & Stronska O. J. Electrical properties of macroporous silicon

structures. *Semiconductor Physics Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2001. V. 4(1). Pp. 40-43.

19. Khokhar M. Q., Hussain S. Q., Pham D. P., Lee S., Park H., Kim Y., ... & Yi J. Simulation of Silicon Heterojunction Solar Cells for High Efficiency with Lithium Fluoride Electron Carrier Selective Layer. *Energies*. 2020. V. 13(7). P. 1635.

20. Jiang Y., Cao S., Lu L., Du G., Lin Y., Wang J., ... & Li D. Post-annealing Effect on Optical and Electronic Properties of Thermally Evaporated MoO<sub>3</sub> Thin Films as Hole-Selective Contacts for p-Si Solar Cells. *Nanoscale research letters*. 2021. V. 16(1). Pp. 1-11.

21. Yadav C., & Kumar S. Numerical simulation for optimization of ultra-thin n-type AZO and TiO<sub>2</sub> based textured p-type c-Si Heterojunction Solar Cells. *Silicon*. 2021. Pp. 1-9.

22. Sawicka-Chudy P., Sibiński M., Wisz G., Rybak-Wilusz E., & Cholewa M. (2018, May). Numerical analysis and optimization of Cu<sub>2</sub>O/TiO<sub>2</sub>, CuO/TiO<sub>2</sub>, heterojunction solar cells using SCAPS. In *Journal of Physics: Conference Series* (Vol. 1033, No. 1, p. 012002). IOP Publishing.

23. Islam R., & Saraswat K. Limitation of optical enhancement in ultra-thin solar cells imposed by contact selectivity. *Scientific reports*. 2018. V. 8(1). Pp. 1-11.

24. Kidalov V., Sosnytska N., Dyadenchuk A., Oleksenko R. ZnO nanowires for photoelectric converter applications. *International Journal of Mathematics and Physics*. 2021. [S.l.], V. 12, No. 2. Pp. 70-78.

25. Mikolášek M. Silicon Heterojunction Solar Cells: The Key Role of Heterointerfaces and their Impact on the Performance. In (Ed.), *Nanostructured Solar Cells*. IntechOpen, 2017. <https://doi.org/10.5772/65020>

26. Louwen A., Van Sark W., Schropp R., Faaij A. A cost roadmap for silicon heterojunction solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2016. V. 147. Pp. 295-314.

27. Sosnytska N. , Dyadenchuk A. , Morozov M. , Khalanchuk L. Modeling of Solar Cells with Quantum Dots GaN”, In *2021 IEEE International Conference on Modern Electrical and Energy Systems (MEES)*. 2021. Pp. 1-5.
28. Diadenchuk A.F. , Kidalov V. V. n-ZnO:Al/porous-CdTe/p-CdTe heterostructures as photoelectric converters. *Nanosystemy, nanomaterialy, nanotekhnologii*. 2017. V. 15, No. 3. Pp. 487-494.
29. Yamaguchi M. 1.21 - Multiple Junction Solar Cells”, Editor(s): Trevor M. Letcher, *Comprehensive Renewable Energy (Second Edition)*. Elsevier, 2022. Pp. 463-480.
30. Kukushkin S. A., Sharofidinov Sh. Sh. , Osipov A. V. , Redkov A. V. , Kidalov V. V. , Grashchenko A. S. , Soshnikov I. P. , Dyadenchuk A. F. The Mechanism of Growth of GaN Films by the HVPE Method on SiC Synthesized by the Substitution of Atoms on Porous Si Substrates. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*. 2018. V. 7, No. 9. Pp. 480-486.
31. Caño P. , Hinojosa M. , Cifuentes L. , Nguyen H. , Morgan A. , Marron D. F. , Garcia I. , Johnson A. , Rey-Stolle I. Hybrid III-V/SiGe solar cells on Si substrates and porous Si substrates. In *2019 IEEE 46th Photovoltaic Specialists Conference (PVSC)*, IEEE, pp. 2513-2518. 2019.
32. Sundarapura P. , Zhang X. M. , Yogai R. , Murakami K. , Fave A. , Ihara M. Nanostructure of Porous Si and Anodic SiO<sub>2</sub> Surface Passivation for Improved Efficiency Porous Si Solar Cells. *Nanomaterials*. 2021. V. 11, No. 2. P. 459.
33. Dyadenchuk A.F. , Kidalov V. V. Films CdS Grown on porous Si Substrate. *J. Nano-Electron. Phys.* 2018. V. 10, No. 1. P. 01007 (4pp).
34. Mendoza-Aguero N., Agarwal V. , Villafan-Vidales H. I. , Campos-Alvarez J. , Sebastian P. J. A Heterojunction Based on Macro-porous Silicon and Zinc Oxide for Solar Cell Application. *Journal of New Materials for Electrochemical Systems*. 2015. V. 18. Pp. 225-230.

35. Algun G., Akçay N. The role of etching current density and porous structure on enhanced photovoltaic performance of ZnO/PS heterojunction solar cells. *Applied Physics A*. 2019. V. 125, No. 8. Pp. 1-11.
36. Iwe I. A., Gosteva E. A., Starkov V. V., Sedlovets D. M., & Mong O. Anti-glare coatings based on porous silicon structures. *ES Materials & Manufacturing*. 2019. V. 3(3). Pp. 47-51.
37. Zhu L., Luo J. K., Shao G., Milne W. I. On optical reflection at heterojunction interface of thin film solar cells. *Solar energy materials and solar cells*. 2013. V. 111. Pp. 141-145.
38. Prasad A., Balakrishnan S., Jain S. K., & Jain G. C. Porous silicon oxide anti-reflection coating for solar cells. *Journal of the Electrochemical Society*. 1982. V. 129(3). P. 596.
39. Wang N. F. , Kuo T. W. , Tsai Y. Z. , Lin S. X. , Hung P. K. , Lin C. L. , Houg M. P. Porous SiO<sub>2</sub>/MgF<sub>2</sub> broadband antireflection coatings for superstrate-type silicon-based tandem cells. *Optics Express*. 2012. V. 20, No. 7. Pp. 7445-7453.
40. Alam K., Ali S., Saboor A., Salman M., Maoz Humayun M., ... & Arif M. Antireflection, superhydrophilic nano-porous SiO<sub>2</sub> coating based on aerosol impact spray deposition technique for solar PV module. *Coatings*. 2019. V. 9(8). P. 497.
41. Janene N. , Ghrairi N., Allagui A. , Alawadhi H., El Khakani M. A. , Bessais B., Gaidi M. Opto-electronic properties of a TiO<sub>2</sub>/PS/mc-Si heterojunction based solar cell. *Applied Surface Science*. 2016. V. 368. Pp. 140-145.
42. Zhao X. , Xu W. , Wu Y. , Wu H. , Xia Z. , Xu H. , Shang Y., Wei J. , Cao A. High-efficiency CNT-Si solar cells based on a collaborative system enabled by oxide penetration. *Nano Res*. 2022. V. 15. Pp. 2497–2504.
43. Abdullah C. A. C., Razak D. F. A., Yunus M. B. M., Zaki M., Yusoff M. Structural and optical properties of n-type and p-type porous silicon produced at different etching time. *International Journal of Electroactive Materials*. 2019. Vol. 7. P. 28–37.

44. Timokhov D. F., Timokhov F. P. Determination of structure parameters of porous silicon by the photoelectric method. *Journal of Physical Studies*. 2004. Vol. 8, No. 2. P. 173–177.
45. Yadav C., Kumar S. Numerical simulation for optimization of ultra-thin n-type AZO and TiO<sub>2</sub> based textured p-type c-Si heterojunction solar cells. *Silicon*. 2021. P. 1–9.
46. Sawicka-Chudy P., Sibiński M., Wisz G., Rybak-Wilusz E., Cholewa M. Numerical analysis and optimization of Cu<sub>2</sub>O/TiO<sub>2</sub>, CuO/TiO<sub>2</sub> heterojunction solar cells using SCAPS. *Journal of Physics: Conference Series*. 2018. Vol. 1033, No. 1. P. 012002.
47. Łuszczek M., Łuszczek G., Świsulski D. Simulation investigation of perovskite-based solar cells. *Przegląd Elektrotechniczny*. 2021. P. 99–102.
48. Sawicka-Chudy P., Starowicz Z., Wisz G., Yavorskyi R., Zapukhlyak Z., Bester M., Głowa L., Sibiński M., Cholewa M. Simulation of TiO<sub>2</sub>/CuO solar cells with SCAPS-1D software. *Materials Research Express*. 2019. Vol. 6, No. 8. P. 085918.
49. Ibraheem Rafah. Modeling and Analysis of Different Antireflection Polymer Coating on Silicon Solar Cell Using Pc1d Software. *Journal of Mechanical Engineering Research and Developments*. 2020. V. 43. Pp. 222-232.
50. Kim J. Y., Lee J. W., Jung H. S., Shin H., Park N. G. High-efficiency perovskite solar cells. *Chemical reviews*. 2020. V. 120(15). Pp. 7867-7918.
51. Powalla M., Paetel S., Ahlswede E., Wuerz R., Wessendorf C. D., Magorian Friedlmeier T. Thin-film solar cells exceeding 22% solar cell efficiency: An overview on CdTe-, Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub>-, and perovskite-based materials. *Applied Physics Reviews*. 2018. V. 5(4).
52. Blakers A., Zin N., McIntosh K. R., Fong K. High efficiency silicon solar cells. *Energy Procedia*. 2013. V. 33. Pp. 1-10.
53. Köhnen E., Jošt M., Morales-Vilches A. B., Tockhorn P., Al-Ashouri A., Macco B., Kegelman L., Korte L., Rech B., Schlatmann R.,

Stannowski B. Highly efficient monolithic perovskite silicon tandem solar cells: analyzing the influence of current mismatch on device performance. *Sustainable Energy & Fuels*. 2019. V. 3(8). Pp. 1995-2005.

54. Zahid M. A., Khokhar M. Q., Kim Y., Yi J. Utilization of CaF<sub>2</sub>/ITO Double-Layer Anti-Reflective Coating for Increasing the Efficiency in Rear Emitter SHJ Solar Cells. *Crystal Research and Technology*. 2022. V. 57(8). Pp. 2100233.

55. Ho W. J., Yang H. Y., Liu J. J., Lin P. J., Ho C. H. Plasmonic effects of two-dimensional indium-nanoparticles embedded within SiO<sub>2</sub> anti-reflective coating on the performance of silicon solar cells. *Applied Surface Science*. 2020. V. 508. Pp. 145275.

56. Дяденчук А. Ф., Кідалов В. В. Гетероструктури n-ZnO:Al/porous-CdTe/p-CdTe в якості фотоелектричних перетворювачів. *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2017. Т. 15, № 3. С. 487-494.

57. Omar A., Ali M. S., Abd Rahim N. Electron transport properties analysis of titanium dioxide dye-sensitized solar cells (TiO<sub>2</sub>-DSSCs) based natural dyes using electrochemical impedance spectroscopy concept: A review. *Solar Energy*. 2020. V. 207. Pp. 1088-1121.

58. Zaien M., Ahmed N. M., Hassan Z. Fabrication and Characterization of an n-CdO/p-Si Solar Cell by Thermal Evaporation in a Vacuum. *Int. j. Electrochem. Sci*. 2013. V. 8. Pp. 6988-6996.

59. Xu M., Xu Z., Sun Z., Chen W., Wang L., Liu Y., ... Pan S. Surface Engineering in SnO<sub>2</sub>/Si for High-Performance Broadband Photodetectors. *ACS Applied Materials & Interfaces*. 2023. V. 15(2). Pp. 3664-3672.

60. Yıldırım H. Excitons in nonpolar ZnO/BeZnO quantum wells: Their binding energy and its dependence on the dimensions of the structures. *Physica B: Condensed Matter*. 2022. V. 639. Pp. 413974.

61. Vyas S. A short review on properties and applications of zinc oxide based thin films and devices: ZnO as a promising material for applications in electronics, optoelectronics, biomedical and sensors. *Johnson Matthey Technology Review*. 2020. V. 64(2). Pp. 202-218.

62. Kanmaz İ. Simulation of CdS/p-Si/p<sup>+</sup>-Si and ZnO/CdS/p-Si/p<sup>+</sup>-Si heterojunction solar cells. *Results in Optics*. 2023. V. 10. Pp. 100353.
63. Dwivedi D. K. Modeling of CZTSSe solar photovoltaic cell for window layer optimization. *Optik*. 2020. V. 222. Pp. 165407.
64. Boudour S., Bouchama I., Hadjab M., Laidoudi S. Optimization of defected ZnO/Si/Cu<sub>2</sub>O heterostructure solar cell. *Optical Materials*. 2019. V. 98. Pp. 109433.
65. Chen L., Chen X., Liu Y., Zhao Y., Zhang X. Research on ZnO/Si heterojunction solar cells. *Journal of Semiconductors*. 2017. V. 38(5). Pp. 054005.
66. Najim S. A. Fabrication of p-Si/ZnO Thin Films Solar Cell by CVD at Different Substrate Temperatures. *College Of Basic Education Researches Journal*. 2019. V. 15(4).
67. Gerlach D., Wilks R. G., Wippler D., Wimmer M., Lozac'h M., Félix R., ... Bär M. The silicon/zinc oxide interface in amorphous silicon-based thin-film solar cells: Understanding an empirically optimized contact. *Applied Physics Letters*. 2013. V. 103(2).
68. Lai K. C., Liu C. C., Lu C. H., Yeh C. H., Houng M. P. Characterization of ZnO: Ga transparent contact electrodes for microcrystalline silicon thin film solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2010. V. 94(3). Pp. 397-401.
69. Abass K. H., Mohammed M. K. Fabrication of ZnO: Al/Si solar cell and enhancement its efficiency via Al-doping. *Nano Biomedicine and Engineering*. 2019. V. 11(2). Pp. 170-177.
70. Abe Y., Kagei T., Sichanugrist P., Konagai M. Development of double-textured ZnO: B substrates for improving microcrystalline silicon solar cell performance. *IEEE Journal of Photovoltaics*. 2014. V. 4(6). Pp. 1374-1379.
71. Ding J., Zhou Y., Dong G., Liu M., Yu D., Liu F. Solution-processed ZnO as the efficient passivation and electron selective layer of silicon solar cells. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*. 2018. V. 26(12). Pp. 974-980.

72. Hussain B., Ebong A., Ferguson I. Zinc oxide as an active n-layer and antireflection coating for silicon based heterojunction solar cell. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2015. V. 139. Pp. 95-100.
73. Chala S., Sengouga N., Yakuphanoglu F., Rahmane S., Bdirina M., Karteri İ. Extraction of ZnO thin film parameters for modeling a ZnO/Si solar cell. *Energy*. 2018. V. 164. Pp. 871-880.
74. Wenas W. W., Riyadi S. Carrier transport in high-efficiency ZnO/SiO<sub>2</sub>/Si solar cells. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2006;90:3261-7
75. Vallisree S., Thangavel R., Lenka L. T. Modelling, simulation, optimization of Si/ZnO and Si/ZnMgO heterojunction solar cells. *Materials Research Express*. 2018. V. 6(2). Pp. 025910.
76. Jamil N. Y., Ivashchenko M. M., Abdulla S. N., Muhammed A. A. K., Pogrebnyak A. D. Design and Fabrication Heterojunction Solarcell of Si-CdS-ZnO Thin Film. In Proceedings of the international conference nanomaterials: applications and properties (No. 1, no. 4, pp. 04NMEEEE09-04NMEEEE09). Sumy State University Publishing. 2012.
77. Zhang M., Gao X., Barra A., Chang P., Huang L., Hellwarth R., Lu J. G. Core-shell structured Si/ZnO photovoltaics. *Materials Letters*. 2015. V. 140. Pp. 59-63.
78. Zhao F., Lin J., Lei Z., Yi Z., Qin F., Zhang J., ... Wu P. Realization of 18.97% theoretical efficiency of 0.9 μm thick c-Si/ZnO heterojunction ultrathin-film solar cells via surface plasmon resonance enhancement. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2022. V. 24(8). Pp. 4871-4880.
79. Chabane L., Zebbar N., Trari M., Kechouane M. Opto-capacitive study of n-ZnO/p-Si heterojunctions elaborated by reactive sputtering method: Solar cell applications. *Thin Solid Films*. 2017. V. 636. Pp. 419-424.
80. Naim H., Shah D. K., Bouadi A., Siddiqui M. R., Akhtar M. S., Kim C. Y. An In-Depth Optimization of Thickness of Base and Emitter of ZnO/Si Heterojunction-Based Crystalline Silicon Solar Cell: A Simulation Method. *Journal of Electronic Materials*. 2022. V. 51(2). Pp. 586-593.

81. Huang F., Guo B., Li S., Fu J., Zhang L., Lin G., ... Cheng Q. Plasma-produced ZnO nanorod arrays as an antireflective layer in c-Si solar cells. *Journal of Materials Science*. 2019. V. 54. Pp. 4011-4023.
82. Singh Bhim, Vivek Gupta. Modelling and simulation of silicon solar cells using PC1D. *Materials Today: Proceedings*. 2022. V. 54. Pp. 810-813.
83. Sharma Rajinder. Silicon nitride as antireflection coating to enhance the conversion efficiency of silicon solar cells. *Turkish Journal of Physics*. 2018. V. 42(4). Pp. 350-355.
84. Dyadenchuk A. F., Kidalov V. V. Films CdS Grown on porous Si Substrate. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2018. V. 10(1). Pp. 01007-1-01007-4.
85. Muhfidin Rivian, Song Yu. Temperature Effects on the Performance of Silicon Solar Cells using PC1D. *Proceedings of the 2nd International Conference on Industrial and Technology and Information Design, ICITID 2021, 30 August 2021, Yogyakarta, Indonesia*. 2021.
86. Abdullah C. A. C., Razak D. F. A., Yunus M. B. M., Zaki M., Yusoff M. Structural and Optical Properties of N-Type and P-Type Porous Silicon Produced at Different Etching Time. *Int. J. Electroactive Mater*. 2019. V. 7. Pp. 28-37.
87. Yadav C., Kumar S. Numerical simulation for optimization of ultra-thin n-type AZO and TiO<sub>2</sub> based textured p-type c-Si Heterojunction Solar Cells. *Silicon*. 2021. Pp. 1-9.
88. Bilyalov R., Stalmans L., Beaucarne G., Loo R., Caymax M., Poortmans J., Nijs J. Porous silicon as an intermediate layer for thin-film solar cell. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2001. V. 65(1-4). Pp. 477-485.
89. Ray J., Chaudhuri T. K., Panchal C., Patel K., Patel K., Bhatt G., Suryavanshi P. PbS-ZnO Solar Cell: A Numerical Simulation. *Journal of Nano-and Electronic Physics*. 2017. V. 9(3).
90. Husen M. J., Aga F. G., Dibaba S. T. Theoretical Performance Analysis of Inverted P3HT: PCBM Based Bulk Hetero-Junction Organic Solar Cells through

Simulation. *Advances in Materials Science and Engineering*. 2023. V. 2023. Article ID 4204298. Pp. 6.

91. King R. R., Mitchell K. W., Gee J. M. Back Surface Cell Structures for Reducing Recombination in CZ Silicon Solar Cells. *Proceedings of 1994 IEEE 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion - WCPEC (A Joint Conference of PVSC, PVSEC and PSEC)*, Waikoloa, USA. 1994.

92. Dyadenchuk A. F., Kidalov V. V. Films CdS Grown on porous Si Substrate. *Journal of Nano- and Electronic Physics*. 2018. Vol. 10(1). Pp. 01007-1-01007-4.

93. Nykyrui L. I., Yavorskyi R. S., Zapukhlyak Z. R., Wisz G., Potera P. Evaluation of CdS/CdTe thin film solar cells: SCAPS thickness simulation and analysis of optical properties. *Optical Materials*. 2019. V. 92. Pp. 319-329.

94. Tsuji M., Aramoto T., Ohyama H., Hibino T., Omura K. Characterization of CdS thin-film in high efficient CdS/CdTe solar cells. *Japanese Journal of Applied Physics*. 2000. V. 39(7R). P. 3902.

95. Morales-Acevedo A. Thin film CdS/CdTe solar cells: research perspectives. *Solar Energy*. 2006. V. 80(6). Pp. 675-681.

96. Dyadenchuk A. F., Oleksenko R. I. Simulation photoconverters of porous-Si/Si with different anti-reflective coatings. *International Journal of Mathematics & Physics*. 2023. V. 14(2). Pp. 89-94.

97. Belarbi M., Benyoucef A., Benyoucef B. Simulation of the solar cells with PC1D, application to cells based on silicon. *Advanced Energy: An International Journal (AEIJ)*. 2014. V. 1(3). Pp. 1-10.

98. Dyadenchuk A. Modeling of Photovoltaic Characteristics of a TiO<sub>2</sub>/Porous-Si/Si-Based Heterojunction Solar Cell. *Nano Hybrids and Composites*. 2024. V. 43. Pp. 13-22.

99. Malitson I. H. Interspecimen comparison of the refractive index of fused silica. *J. Opt. Soc. Am.* 1965. V. 55. Pp. 1205-1208

100. Bond W. L. Measurement of the refractive indices of several crystals, *J. Appl. Phys.* 1965. V. 36. Pp. 1674-1677.

101. König T. A. F., Ledin P. A., Kerszulis J., Mahmoud M. A., El-Sayed M. A., Reynolds J. R., Tsukruk V. V. Electrically tunable plasmonic behavior of nanocube-polymer nanomaterials induced by a redox-active electrochromic polymer. *ACS Nano*. 2014. V. 8. Pp. 6182-6192.
102. Devore J. R. Refractive indices of rutile and sphalerite. *J. Opt. Soc. Am.* 1951. V. 41. Pp. 416-419.
103. Debenham M. Refractive indices of zinc sulfide in the 0.405-13- $\mu\text{m}$  wavelength range. *Appl. Opt.* 1984. V. 23. Pp. 2238-2239.
104. Treharne R. E., Seymour-Pierce A., Durose K., Hutchings K., Roncallo S., Lane D. Optical design and fabrication of fully sputtered CdTe/CdS solar cells. *J. Phys: Conf. Ser.* 2011. V. 286. P. 012038.
105. Ameer S. B., Barhoumi A., Mimouni R., Duponchel B., Leroy G., Amlouk M., Guermazi H. Physical investigations on undoped and Fluorine doped SnO<sub>2</sub> nanofilms on flexible substrate along with wettability and photocatalytic activity tests. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2017. V. 61. Pp. 17-26.
106. Malitson I. H., Dodge M. J. Refractive Index and Birefringence of Synthetic Sapphire. *J. Opt. Soc. Am.* 1972. V. 62. P. 1405.
107. Назарова О.П., Дьоміна Н.А. Когнітивне моделювання факторів системи – туризм. *The 16th International conference "Science and society"* (December 27, 2019) Accent Graphics Communications & Publishing, Hamilton, Canada. 2019. p.150-161
108. Назарова О.П., Попович С. В. Когнітивна модель факторів системи – туризм. *Актуальні проблеми розвитку природничих та гуманітарних наук: зб. матер. Міжнар. наук.-практ. конф. (5 груд. 2019 р.) /* відп. ред. Зінченко М. О., Л. Л. Макарук. Луцьк, 2019. – 537-538 с.
109. Скибинський С.В. Маркетинг : підручник. Л., 2000. Ч. 1. 640 с.
110. Kosko B. Fuzzy cognitive maps. *International Journal of Man-Machine Studies*. 1986. Vol. 24, No. 1. P. 65–75.

111. Aanjaneya M., Gao M., Liu H., Batty C., Sifakis E. Power Diagrams and Sparse Paged Grids for High Resolution Adaptive Liquids. *ACM transactions on graphics*. 2017. Vol. 36, No 4. DOI: 10,1145/3072959.3073625
112. Bonazzoli M., Rapetti F., Venturini C. Dispersion analysis of triangle-based Whitney element methods for electromagnetic wave propagation. *Applied mathematics and computation*. 2018. Vol. 319. P. 274-286.
113. Chen L., Lingen E. J., de Borst R. Adaptive hierarchical refinement of NURBS in cohesive fracture analysis. *Numerical Methods in Engineering*. 2017. Vol. 112, No 13. P. 2151-2173.
114. Назарова О. П., Ярчук А. В. Когнітивний підхід до управління продуктивністю праці та якістю життя. *The 9th International conference Science and society* (February 1, 2018) Accent Graphics Communications & Publishing, Hamilton, Canada. 2019. p.1295-1307.
115. Бігун Я. Й., Скутар І. Д. Усереднення в багаточастотних системах із запізненням та локально-інтегральними умовами. *Буковинський матем. журнал*. 2020. Т. 8, № 2. С. 14–23.
116. Samoilenko A., Petryshyn R. Multifrequency Oscillations of Nonlinear Systems. Dordrecht: Boston/London: Kluwer Academic Publishers, 2004. 317 p.
117. Бігун Я.Й. Усереднення в багаточастотних системах диференціально-функціо-нальних рівнянь: дис. ... докт. фіз.-мат. наук: 01.01.02 – диференціальні рівняння. Київський нац. ун-т імені Тараса Шевченка. Київ, 2009. 298 с.
118. Бігун Я. Й., Краснокутська І. В., Петришин Р. І. Усереднення в багаточастотних системах із лінійно перетвореними аргументами і багатоточковими та інтегральними умовами. *Буковинський матем. журнал*. 2016. Т. 4, № 3–4. С. 30–35.
119. Bihun Ya., Petryshyn R., Skutar I., Melnyk H. Multifrequency system with multipoint and integral conditionsю Acta et Coomentationes, Exact and Natural Sciences. – Nr. 2(12), 2021. P. 11–24.

120. Henderson J., Luca R. Boundary Value Problems for Systems of Differential, Difference and Fractional Equation. Kluwer, Dordrecht–Boston–London, Netherlands, 2016. 307 p.
121. Chikrij A.A. Conflict-Controlled Processes. Kluwer, Boston-London–Dordrecht: Springer Science and Business Media, 2013. 424 p.
122. Atroshenko O., Tkachuk M., Martynenko O., Tkachuk M., Saverska M., Hrechka I., Khovansky S. (). The Study of Multicomponent Loading Effect on Thin-Walled Structures With Bolted Connections. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2019. V.1 (7 (97)). Pp. 15-25.
123. Tkachuk M.M., Grabovskiy A., Tkachuk M.A., Hrechka I., Ishchenko O., Domina N. Investigation of multiple contact interaction of elements of shearing dies. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2019. V. 4(7 (100)). Pp. 6–15.
124. Johnson K.L. Contact Mechanics. Cambridge University Press, 1985. 462 p.
125. Грабовський А.В., Ткачук М.А., Дьоміна Н.А., Ткачук Г.В., Іщенко О.А., Ткачук М.М. та ін. Чисельний аналіз контактної взаємодії тіл із поверхнями близької форми. *Вісник Національного технічного університету «ХПІ», серія: Машинознавство та САПР*. 2021. Вип. 2. С. 29-38.
126. Ткачук М.М. Контактна механіка тіл із урахуванням нелінійних властивостей поверхневих та проміжних шарів. Видання друге. Дніпро: Видавець Обдимко Ольга Станіславівна, 2023. 255 с.
127. Грабовський А.В., Ткачук М.А., Кохановська О.В., Ткачук Н.А., Дьоміна Н.А., Ткачук Г.В. та ін. Контактна взаємодія тіл близької форми за малого збурення розподілу початкового зазору. *Вісник Національного технічного університету «ХПІ», серія: Машинознавство та САПР*. 2022. Вип. 2. С. 23–34.
128. Washizu K. Variational Methods in Elasticity and Plasticity. *Pergamon Press*, 1975. 420 p.

129. Чопоров С.В., Гоменюк С.І., Алатамнех Х.Х., Оспіщев К.С. Методи побудови дискретних моделей: структуровані та блочно-структуровані сітки. *Вісник Запорізького національного університету*: Збірник наукових статей. Фізико-математичні науки. 2016. № 1. С. 272-284.
130. Чопоров С.В., Лісняк А.О., Борисовська Ю.О., Козлова О.С., Снежкова Л.С. Методи побудови дискретних моделей: неструктуровані сітки. *Вісник Запорізького національного університету*: Збірник наукових статей. Фізико-математичні науки. 2016. № 2. С. 237-250.
131. Bianchi G., Rane S., Kovacevic A., Cipollone R., Murgia S., Contaldi G. Grid generation methodology and CFD simulations in sliding vane compressors and expanders. *IOP Conference Series-Materials Science and Engineering*. 2017. Vol. 232. DOI: 10.1088/1757-899X/232/1/012053
132. Jasak H. OpenFOAM: Open source CFD in research and industry. *International Journal of Naval Architecture and Ocean Engineering*. 2009. Vol. 1, No. 2. P. 89–94.
133. Okhotnikov D.I. Direct Numerical Simulation of Laminar-Turbulent Transition on Grids with Local Refinement. *Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta-seriya fiziko-matematicheskie nauki*. 2017. Vol. 159, No 2. P. 216-230.
134. Dolgov S.V, Kazeev V.A., Khoromskij B.N. Direct tensor-product solution of one-dimensional elliptic equations with parameter-dependent coefficients. *Mathematics and computers in simulation*. 2018. Vol. 145. P. 136-155.
135. Raeli A., Bergmann M., Iollo A. A finite-difference method for the variable coefficient Poisson equation on hierarchical Cartesian meshes. *Journal of computational physics*. 2018. Vol. 355. P. 59-77.
136. Takenaka H., Komatsu M., Toyokuni G., Nakamura T., Okamoto T. Quasi-Cartesian finite-difference computation of seismic wave propagation for a three-dimensional sub-global model. *Earth planets and space*. 2017. Vol. 69. DOI: 10.1186/s40623-017-0651-1
137. AbdelMigid T.A., Saqr K.M., Kotb M.A., Aboelfarag A.A. Revisiting the lid-driven cavity flow problem: Review and new steady state benchmarking

results using GPU accelerated code. *Alexandria engineering journal*. 2017. Vol. 56, No 1. P. 123-135.

138. Fort J., Furst J., Halama, J. Numerical simulation of flow through cascade in wind tunnel test section and stand-alone configurations. *Applied mathematics and computation*. 2018. Volume: 319 Pages: 633-646.

139. Koblitz A.R., Lovett S., Nikiforakis N. Direct numerical simulation of particulate flows with an overset grid method. *Journal of computational physics*. 2017. Vol. 343. P. 414-431.

140. Лісняк А.О., Чопоров С.В., Гоменюк С.І. Методика візуалізації геометричних об'єктів, описаних за допомогою R-функцій. Вісник Запорізького національного університету: *Збірник наукових статей. Фізико-математичні науки*. 2010. № 1. С. 88-97.

141. Bonazzoli M., Rapetti F., Venturini C. Dispersion analysis of triangle-based Whitney element methods for electromagnetic wave propagation. *Applied mathematics and computation*. 2018. Vol. 319. P. 274-286.

142. Chen L., Lingen E. J., de Borst R. Adaptive hierarchical refinement of NURBS in cohesive fracture analysis. *Numerical Methods in Engineering*. 2017. Vol. 112, No 13. P. 2151-2173.

143. Zhao P., Chan C. H., Wang G. An Improved Full-Wave Multilevel Green's Function Interpolation Method With RBF-QR Technique for Fast Field Evaluation. *IEEE ACCESS*. 2017. Vol. 5. P. 10241-10249.

144. Thompson J.F., Soni B.K., Weatherill N.P. Handbook of Grid Generation. *Boca Raton: CRC Press*. 1998. 1096 p.

145. Каліон В.А. Обчислювальна гідромеханіка. Модельні задачі: навч. посібник. Київ. Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет». 2011. 175 с.