



ОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

9 • 2012

Науково-теоретичний журнал Президії Національної академії наук України

Заснований у 1939 р.

Виходить щомісяця

РЕДАКЦІЙНА КОЛЕГІЯ ЖУРНАЛУ

А. Г. НАУМОВЕЦЬ (головний редактор), П. І. Андон, С. А. Андронаті, Л. А. Булавін, А. Ф. Булат, Г. М. Гавричкова (заст. головного редактора), В. М. Геєць (заст. головного редактора з наук. питань), В. В. Гончарук, В. Т. Грінченко, Я. М. Григоренко, Д. М. Гродзинський, В. М. Єремєєв, В. О. Іванов, І. М. Коваленко, С. В. Комісаренко, В. П. Кухар, В. М. Локтєв, О. О. Мойбенко, В. В. Моргун, І. М. Неклюдов, Г. Г. Полікарпов, В. Д. Походенко, І. К. Походня, А. М. Самойленко, В. П. Семиноженко, І. В. Сергієнко, В. І. Старостенко, Б. С. Стогній, В. М. Шестопапов, Я. С. Яцків

© Національна академія наук України, 2012

Зміст

Математика

- Гефтер С. Л., Стулова Т. Е.* О корректности некоторого нерезонансного операторно-дифференциального уравнения в пространстве целых функций экспоненциального типа 7
- Ковалев А. М., Неспирный В. Н., Суйков А. С.* Существование функции со знаком-постоянной производной для автономных систем дифференциальных уравнений 13
- Лавренюк Я. В.* Про незвідні системи твірних у групах автоморфізмів кореневих дерев . 19

Інформатика та кібернетика

- Зуб С. С., Ляшко С. И., Ляшко В. С.* Об устойчивости орбитального движения двух магнитных тел 23
- Скобелев В. В.* Анализ задачи распознавания автомата над кольцом 29
- Стоян В. А., Двірничук К. В.* До побудови інтегрального еквіваленту лінійних диференціальних моделей 36
- Шевченко А. И., Миненко А. С., Золотухина О. А.* Численный анализ одной нелинейной математической модели 44

Механіка

- Жук О. П., Кубенко В. Д., Жук Я. О.* Про радіаційну силу плоскої акустичної хвилі, яка діє на тверде сферичне тіло в заповненій рідиною циліндричній порожнині 48
- Лила Д. М.* Эксцентричная форма неустойчивости вращающегося составного плоского кругового диска 55
- Мартынюк А. А.* О стабилизации движения систем с последствием импульсными возмущениями 62

Фізика

- Аверков Ю. О.* Влияние дефектного слоя на границе фотонного кристалла и плазмподобной среды на свойства поверхностных электромагнитных состояний 66

Теплофізика

- Круковский П. Г., Яцевский В. А.* Гидродинамические особенности течения и теплообмена во взаимосвязанных каналах силовых масляных трансформаторов 72

Матеріалознавство

- Азаренков М. О., Кіріченко В. Г., Коваленко О. В., Литовченко С. В.* Фазові перетворення інтерметалідів та моделювання ядерних трансмутаційних ефектів у цирконієвих сплавах 79

Науки про Землю

- Гулін С. Б., Артемов Ю. Г., Єгоров В. М., Полікарпов Г. Г., Євтушенко Д. Б.*
Еколого-географічний феномен: підводний канал на континентальному схилі в північно-західній частині Чорного моря 89
- Еремеев В. Н., Жуков А. Н., Крашенинникова М. А., Сизов А. А., Чехлан А. Е.*
Климатическая изменчивость индекса САК и связанные с ней процессы в верхнем слое Северной Атлантики 94
- Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н., Самсонов А. И., Божжежа Д. Н.*
Новые данные о перспективах нефтегазоносности шельфа Черного моря в районе расположения структур Субботина и Палласа 100
- Мостовой В. С.* О корректности задачи нелинейной регрессии и сходимости алгоритма поиска глобального минимума в моделях мониторинга 107

Хімія

- Бондарь Ю. В., Хан Д. Х.* Оптимизация условий радиационно-химического синтеза полипропиленовых волокон с карбоксильными группами 111
- Манило М. В., Арьев И. А., Литвинов Г. С.* Адсорбция глицина углеродными нанотрубками 118
- Савельев Ю. В., Янович И. В., Ахранович Е. Р., Марковская Л. А., Будаш Ю. А., Савельева О. А.* Пенополиуретаны на основе природных полисахаридов 124

Біологія

- Межжерин С. В., Костюк В. С., Жалай Е. И.* Аллозимные и морфологические доказательства реальности двух симпатрических видов пресноводных раков в пределах *Pontastacus leptodactylus* (Eschscholtz, 1823) (Decapoda: Astacidae) 131
- Карпец Ю. В., Колупаев Ю. Е., Ястреб Т. О., Дмитриев А. П.* Возможное взаимодействие сигнальных систем при индуцировании устойчивости растительных клеток к тепловому стрессу 136
- Клименко О. М., Сиваш О. О., Кордюм Є. Л.* Пластичність фотосинтетичного апарату листків гетерофільної рослини *Nuphar lutea* (L.) Smith. 142
- Кочевенко А. С., Ферні А. Р.* Клонування та картування гена, що кодує нову позамітохондріальну ізоформу амінотрансферази культурного томата, задіяну в деградації амінокислот з розгалуженим ланцюгом 148

Біохімія

- Андронати С. А., Шестеренко Е. А., Артеменко А. Г., Полищук П. Г., Муратов Е. Н., Севастьянов О. В., Романовская И. И., Кузьмин В. Е.* Исследование влияния ионов металлов на активность карбоксилэстеразы печени свиньи методом QSAR 154
- Семенюта И. В., Ковалишин В. В., Прокопенко В. В.* Создание QSAR моделей для поиска ингибиторов трипсина 159

<i>Спивак Н. Я., Кочетов А. В., Лозова О. Ё., Юзвенко Л. В., Сабирова Т. Ю., Демченко А. А., Диденко Л. Ф.</i> Восприимчивость трансгенных растений картофеля к вирусу ожога гречихи	165
--	-----

Біофізика

<i>Чалый А. В.</i> Синергетическое подобие процессов нуклеации и канцерогенеза: следствия и перспективы	170
---	-----

Contents

Mathematics

<i>Gefter S. L., Stulova T. E.</i> On the well-posedness of some nonresonant operator differential equations in a space of entire functions of exponential type	7
<i>Kovalev A. M., Nesporny V. N., Suykov A. S.</i> Existence of a function with constant-sign derivative for autonomous systems of differential equations	13
<i>Lavrenyuk Ya. V.</i> On the irreducible systems of generatrices in the automorphism groups of rooted trees	19

Information Science and Cybernetics

<i>Zub S. S., Lyashko S. I., Lyashko V. S.</i> About the orbital motion stability of two magnetic bodies	23
<i>Skobelev V. V.</i> Analysis of the problem of recognition of an automaton over some ring	29
<i>Stoyan V. A., Dvirnychuk K. V.</i> Constructing the integral equivalent of linear differential models	36
<i>Shevchenko A. I., Mimenko A. S., Zolotukhina O. A.</i> Numerical analysis of a nonlinear mathematical model	44

Mechanics

<i>Zhuk O. P., Kubenko V. D., Zhuk Ya. O.</i> On the radiation force of a plane acoustic wave acting on a solid spherical body in a liquid-filled cylindrical cavity	48
<i>Lila D. M.</i> Eccentric instability form of a rotating composite plane circular disc	55
<i>Martynyuk A. A.</i> On the stabilization of a motion of hybrid systems with aftereffect	62

Physics

<i>Averkov Yu. O.</i> Influence of a defective layer at the interface between a photonic crystal and a plasma-like medium on properties of surface electromagnetic states	66
---	----

Heat physics

- Krukovskiy P. G., Yatsevskiy V. A.* The hydrodynamic characteristics of a flow and the heat transfer in the interconnected channels of oil power transformers 72

Materials science

- Azarenkov N. A., Kirichenko V. G., Kovalenko O. V., Lytovchenko S. V.* Phase transformations of intermetallides and the simulation of nuclear transmutation effects in zirconium alloys 79

Geosciences

- Gulin S. B., Artemov Yu. G., Egorov V. N., Polikarpov G. G., Evtushenko D. V.* Ecological-geographical phenomenon: the underwater channel on the continental slope in the NW part of the Black Sea 89
- Eremeev V. N., Zhukov A. N., Krashenninnikova M. A., Sizov A. A., Chekhlan A. E.* Climatic variability of the NAO index and related processes in the upper layer of the North Atlantic . 94
- Levashov S. P., Yakymchuk N. A., Korchagin I. N., Samsonov A. I., Bozhezha D. N.* New data on the oil-and-gas prospects of the Black Sea offshore in the location area of the Subbotin and Pallas structures 100
- Mostovyi V. S.* About the correctness of a nonlinear problem of regression and convergence of an algorithm of search for a global minimum in models of monitoring 107

Chemistry

- Bondar Iu. V., Han D. H.* Optimization of conditions of radiation-chemical synthesis of polypropylene fibers with carboxyl groups 111
- Manilo M. V., Ar'ev I. A., Lytvynov G. S.* Adsorption of glycine onto carbon nanotubes 118
- Savelyev Yu. V., Yanovych I. V., Akhranovych O. R., Markovskaya L. A., Budash Yu. A., Savelyeva O. O.* Polyurethane foams based on natural polysaccharides 124

Biology

- Mezhzherin S. V., Kostyuk V. S., Zhalay E. I.* Allozymic and morphological evidences of two sympatric species within *Pontastacus leptodactylus* (Eschscholtz, 1823) (Decapoda: Astacidae) 131
- Karpets Yu. V., Kolupaev Yu. Ye., Yastreb T. O., Dmitriev O. P.* Possible interaction of signal systems at the induction of plant cells resistance to heat stress 136
- Klymenko O. M., Sivash O. O., Kordyum E. L.* Plasticity of the photosynthetic apparatus in leaves of *Nuphar lutea* (L.) Smith. heterophyllous plants 142
- Kochevenko A. S., Fernie A. R.* Cloning and mapping of the gene encoding a new extramitochondrial aminotransferase isoform of cultivated tomato which is involved in the degradation of branched chain amino acids 148

Biochemistry

Andronati S. A., Shesterenko E. A., Artemenko A. G., Polyschuk P. G., Muratov E. N., Sevastyanov O. S., Romanovska I. I., Kuz'min V. E. Investigation of metal ions influence on the activity of pig liver carboxyl esterase by the QSAR method 154

Smenyuta I. V., Kovalishin V. V., Prokopenko V. V. Creation of QSAR models to search for inhibitors of trypsin 159

Spivak N. Ya., Kochetov A. V., Lozova O. I., Yuzvenko L. V., Sabirova T. Yu., Demchenko A. A., Didenko L. F. The sensibility of transgenic plants of potato to bucwheat burn virus 165

Biophysics

Chalyi A. V. Synergetic similarity of nucleation and cancer genesis processes: consequences and perspectives 170

Редактори розділів

Л. М. Литвинова, Л. І. Пузанкова, Т. І. Хоменко

Оформлення художника В. Г. Самсонова

Комп'ютерна верстка В. І. Бойко, Г. В. Попович

Видавничий дім «Академперіодика»

Свідоцтво про внесення до Держреєстру суб'єкта видавничої справи

серії ДК № 544 від 27.07.2001

01004, Київ, вул. Терещенківська, 4

Підписано до друку 10.09.2012. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 18,48. Обл.-вид. арк. 16.

Тираж 266 прим. Зам. 3381. Ціна 25 грн.

Друкарня Видавничого дому «Академперіодика». 01004, Київ, вул. Терещенківська, 4



УДК 517.983

© 2012

С. Л. Гефтер, Т. Е. Стулова

**О корректности некоторого нерезонансного
операторно-дифференциального уравнения
в пространстве целых функций экспоненциального типа**

(Представлено академиком НАН Украины Е. Я. Хрусловым)

Пусть E — банахово пространство и A — замкнутый линейный оператор в E с областью определения, которая может не быть плотной в пространстве E . Мы предполагаем, что оператор A имеет ограниченный обратный оператор и доказываем корректность дифференциального уравнения $w' = Aw + f(z)$ в специальном пространстве целых функций.

1. Пусть E — банахово пространство и $Q: E \rightarrow E$ — ограниченный линейный оператор. Рассмотрим линейное уравнение второго рода

$$Qu + b = u. \quad (1)$$

Если спектральный радиус $\rho(Q)$ оператора Q меньше 1, то для любого $b \in E$ уравнение (1) имеет единственное решение

$$u = b + \sum_{n=1}^{\infty} Q^n b, \quad (2)$$

и это решение непрерывно зависит от вектора b . Таким образом, в этом случае уравнение (1) является корректным. Условие $\rho(Q) < 1$ можно рассматривать как тот факт, что оператор Q является “малым параметром”. В настоящей работе изучается линейное дифференциальное уравнение в банаховом пространстве, являющееся аналогом уравнения (1), а именно, рассматривается следующее неявное линейное дифференциальное уравнение:

$$Tw' + g(z) = w, \quad (3)$$

где $T: E \rightarrow E$ — ограниченный линейный оператор, g — E -значная целая функция. Вместо ряда (2) мы получаем ряд

$$w(z) = g(z) + \sum_{n=1}^{\infty} T^n g^{(n)}(z). \quad (4)$$

Этот ряд является конечной суммой в следующих алгебраических ситуациях: 1) g — полином; 2) оператор T нильпотентен. В общем случае мы показываем, что для сходимости ряда (4) достаточно малости пары (T, g) в том смысле, что $\rho(T)\sigma(g) < 1$, где $\sigma(g)$ — экспоненциальный тип функции g (см. теорему 1). Кроме того, мы получаем интегральное представление типа Коши для решения уравнения (3) (см. теорему 9).

Используя уравнение (3), мы изучаем неоднородное уравнение

$$w' = Aw + f(z) \tag{5}$$

с замкнутым обратимым оператором в нерезонансном случае, т. е. в случае, когда экспоненциальный тип функции $f(z)$ меньше, чем $\min \{|\lambda| : \lambda \in \sigma(A)\}$, где $\sigma(A)$ — спектр оператора A . Здесь мы не предполагаем, что область определения оператора A плотна. В качестве следствия теоремы 1 получаем утверждение о корректной разрешимости неоднородного уравнения (5) в пространстве целых функций экспоненциального типа (см. теорему 2).

Отметим, что линейные неоднородные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве исследовались в многочисленных работах (см., например, [1–5]). В большинстве случаев эти уравнения были изучены с помощью техники теории полугрупп. В частности, для получения решения неоднородного уравнения нужно было знать решения однородного уравнения. Уравнение на полуоси с оператором, который имеет неплотную область определения, изучалось в работах П. Соболевского и Ю. Сильченко [6], Ж. Де Прато и Е. Синестрати [7] (см. также [5, раздел 3.5]). Неявные линейные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве исследовались в работе [8] (см. также приведенную там библиогр.). Целые и голоморфные решения явных и неявных линейных дифференциальных уравнений в комплексном банаховом пространстве были рассмотрены в [3, 9–12] и других работах. Эволюционное уравнение с неоднородной частью в виде полинома изучалось в работе [13]. Голоморфные решения в форме (4), возможно, впервые были изучены в [14], где рассматривался случай, когда функция $g(z)$ имеет нулевой экспоненциальный тип. В работе [15] изучались голоморфные решения линейных дифференциальных уравнений в банаховом пространстве над неархимедовым полем.

2. Рассмотрим множество E_σ всех целых E -значных функций $f(z)$, для которых $\sup_{z \in \mathbb{C}} (\|f(z)\| e^{-\sigma|z|}) < +\infty$. Тогда E_σ — банахово пространство относительно нормы $\|f\|_\sigma = \sup_{z \in \mathbb{C}} (\|f(z)\| e^{-\sigma|z|})$. Для $0 < \sigma \leq \infty$ положим $\tilde{E}_\sigma = \bigcup_{\sigma_1 < \sigma} E_{\sigma_1}$. Тогда \tilde{E}_σ — пространство целых E -значных функций экспоненциального типа, меньшего, чем σ (если $\sigma = \infty$, то \tilde{E}_∞ — пространство всех функций экспоненциального типа). Будем рассматривать это пространство с естественной топологией индуктивного предела банаховых пространств.

Теорема 1 (о корректности уравнения (3) в пространстве \tilde{E}_{σ_0}). Пусть $T: E \rightarrow E$ — ограниченный линейный оператор, $\sigma_0 = 1/\rho(T)$, $\sigma < \sigma_0$ и $g(z)$ — целая функция экспоненциального типа σ (в случае, когда $\rho(T) = 0$, т. е. T квазинильпотентный, мы считаем, что $1/\rho(T) = \infty$). Тогда уравнение (3) имеет единственное целое решение экспоненциального типа σ , $w(z) = \sum_{n=0}^{\infty} T^n g^{(n)}(z)$, этот ряд сходится равномерно на компактных множествах и решение непрерывно зависит от g в топологии пространства \tilde{E}_{σ_0} .

Доказательство. Пусть $\sigma < \sigma_1 < \sigma_0$ и $f \in E_{\sigma_1}$. Применяя интегральную формулу Коши, можно показать, что оператор дифференцирования D ограничен в E_{σ_1} и $\|D^n\| \leq n! e^n n^{-n} \sigma_1^n$. Положим $Q = \tilde{T}D$, где $(\tilde{T}f)(z) = Tf(z)$. Теперь заметим, что $g \in E_{\sigma_1}$

и уравнение (3) может быть переписано в виде уравнения второго рода $Qw + g = w$. Так как операторы \tilde{T} и D коммутируют, то по формуле Гельфанда $\rho(Q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{\|Q^n\|} \leq \leq \rho(T)\sigma_1 < 1$. Следовательно, в пространстве E_{σ_1} уравнение (3) имеет единственное решение $w = \sum_{n=0}^{\infty} Q^n g = \sum_{n=0}^{\infty} T^n g^{(n)}$. Так как $g \in \bigcap_{\sigma_1 > \sigma} E_{\sigma_1}$, то мы получаем, что уравнение (3) имеет единственное решение экспоненциального типа, не большего, чем σ . Поскольку $g(z) = w(z) - Tw'(z)$, то экспоненциальный тип $w(z)$ не может быть меньше σ . Таким образом, он равен σ . Так как оператор $(I - Q)^{-1}$ непрерывен в каждом пространстве E_{σ_1} , $\sigma_1 > \sigma$, то отсюда следует и непрерывная зависимость решения от g . Равномерная сходимост в компактах ряда (4) следует из сходимости в пространстве E_{σ_1} . Теорема доказана.

Пусть теперь A — замкнутый линейный оператор в пространстве E с областью определения $D(A)$, которая может не быть плотной в E . Рассмотрим дифференциальное уравнение (5).

Теорема 2 (о корректности уравнения (5) в нерезонансном случае в пространстве \tilde{E}_{σ_0}). Пусть замкнутый оператор $A: D(A) \rightarrow E$ имеет ограниченный обратный и $f(z)$ — целая функция экспоненциального типа, меньшего $\sigma_0 = \min\{|\lambda|: \lambda \in \sigma(A)\}$. Тогда уравнение (5) имеет единственное целое решение экспоненциального типа, меньшего σ_0 , $w(z) = -\sum_{n=0}^{\infty} A^{-(n+1)} f^{(n)}(z)$, и это решение непрерывно зависит от f в топологии пространства \tilde{E}_{σ_0} .

Доказательство. Пусть $T = A^{-1}$. Тогда $\sigma_0 = 1/\rho(T)$. Если $\sigma_1 < \sigma_0$, $f \in E_{\sigma_1}$ и $g(z) = -A^{-1}f(z)$, то $g \in E_{\sigma_1}$. Теперь остается только заметить, что уравнение (5) эквивалентно уравнению (3).

Рассмотрим некоторые примеры.

С нашей точки зрения, теорема 2 интересна даже в одномерном случае.

Пример 1. Пусть $E = \mathbb{C}$ и $A = I$. Рассмотрим дифференциальное уравнение $w' = w + f(z)$. Если $f(z)$ — целая функция экспоненциального типа $\sigma < 1$, то это уравнение имеет единственное целое решение экспоненциального типа σ , $w(z) = -\sum_{n=0}^{\infty} f^{(n)}(z)$, и это решение непрерывно зависит от правой части f в топологии пространства \tilde{E}_1 .

Пример 2. Рассмотрим следующее уравнение вынужденных колебаний: $\ddot{x} + \omega^2 x = f(t)$, где $\omega > 0$ и $f(t)$ — след целой функции экспоненциального типа σ на вещественной оси. Переходя к системе уравнений первого порядка, получаем, что при $\sigma < \omega$ это уравнение имеет единственное решение $x(t) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\omega^{2k+2}} f^{(2k)}(t)$, которое можно продолжить до целой функции экспоненциального типа σ .

Пример 3. Пусть E — гильбертово пространство, A — замкнутый нормальный оператор в E с дискретным спектром и $0 \notin \sigma(A)$. Пусть $\{e_k\}$ — ортонормированный собственный базис для A , $Ae_k = \lambda_k e_k$, где $\lambda_k \rightarrow \infty$. Если $|\lambda_1| = \min_k |\lambda_k|$, $f: \mathbb{C} \rightarrow E$, $f(z) = \sum_k f_k(z)e_k$ — целая функция и экспоненциальный тип f меньше, чем $|\lambda_1|$, то уравнение (5) $w' = Aw + f(z)$ имеет следующее единственное целое решение, экспоненциальный тип которого меньше, чем $|\lambda_1|$: $w(z) = -\sum_{n=0}^{\infty} \left(\sum_k \lambda_k^{-(n+1)} f_k^{(n)}(z) e_k \right)$.

Пример 4. Пусть $E = C[0, 1]$, $A = d^2/dx^2$ и $D(A) = \{u \in C^2[0, 1]: u(0) = u(1) = 0\}$. Тогда оператор A обратим, $(A^{-1}h)(x) = \int_0^1 G(x, y)h(y) dy$, где G — функция Грина для соответствующей

шей краевой задачи, $\rho(A^{-1}) = 1/\pi^2$ и $(A^{-(n+1)}h)(x) = \int_0^1 G_{n+1}(x, y)h(y) dy$, где $G_1(x, y) = G(x, y)$ и $G_{n+1}(x, y) = \int_0^1 G_n(x, s)G(s, y) ds$.

В этом примере при переходе на вещественную ось уравнение (5) принимает форму краевой задачи для уравнения теплопроводности на отрезке $[0, 1]$ с нулевыми граничными условиями:

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + f(t, x), & t \in \mathbb{R}, \quad x \in (0, 1), \\ w(t, 0) = w(t, 1) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Если $f(t, x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x)t^n$, где $c_n \in C[0, 1]$ и $\overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} \sqrt[n]{n! \|c_n\|} < 1/\pi^2$, то задача (5) имеет решение $w(t, x) = - \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^1 G_{n+1}(x, y) \partial^n f / \partial t^n(t, y) dy$.

Пример 5. Пусть $E = C[0, 1]$, $A = d/dx$ и $D(A) = \{u \in C^1[0, 1]: u(0) = 0\}$. Тогда $(A^{-(n+1)}h)(x) = (1/n!) \int_0^x (x-y)^n h(y) dy$ и $\rho(A^{-1}) = 0$. При переходе на вещественную ось уравнение (5) примет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial w}{\partial x} + f(t, x), & t \in \mathbb{R}, \quad x \in (0, 1), \\ w(t, 0) = 0. \end{cases} \quad (7)$$

Если f можно продолжить до целой функции экспоненциального типа по второй переменной, то в этом классе функций задача (5) имеет единственное решение

$$w(t, x) = - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^x (x-y)^n \frac{\partial^n f}{\partial t^n}(t, y) dy = - \int_0^x f(t+x-y, y) dy.$$

Важно отметить, что задача (7) для однородного уравнения имеет только нулевое решение даже в классе непрерывно дифференцируемых функций. В частности, оператор A не является оператором Хилле–Йосиды (см. [5, 3.5]).

Покажем теперь, что в случае, когда $g(z)$ — целая функция, не являющаяся функцией экспоненциального типа, уравнение (3) может вообще не иметь непрерывно дифференцированного решения на отрезке $[0, t_0]$, $t_0 > 0$, даже если $\rho(T) = 0$.

Пример 6. Пусть E — гильбертово пространство с ортонормированным базисом $\{e_n\}_{n=0}^{\infty}$, T — такой оператор взвешенного сдвига, что $Te_n = e_{n+1}/\sqrt{n+1}$, и $g(z) = e^{z^2} e_0$. Если $w(t) = \sum_{n=0}^{\infty} w_n(t)e_n$ является решением уравнения (3) на отрезке $[0, t_0]$, то

$$\begin{cases} e^{t^2} = w_0(t), \\ \frac{1}{\sqrt{n+1}} w'_n(t) = w_{n+1}(t), & t \in [0, t_0], \quad n \geq 0. \end{cases}$$

Отсюда следует, что $w_n(t) = (1/\sqrt{n!})(e^{t^2})^{(n)}$ и $w_{2n}(0) = \sqrt{(2n)!}/n!$. Поэтому $\sum_{n=0}^{\infty} |w_n(0)|^2 = +\infty$, а это противоречит тому, что w — E -значная функция.

Из теоремы 1 для решения уравнения (3) можно получить интегральное представление типа Коши. Для этого мы используем интегральную формулу Коши для n -й производной

$g^{(n)}(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{|\zeta|=r} \frac{g(\zeta)d\zeta}{(\zeta - z)^{n+1}}$ и следующее понятие формального интеграла в пространстве формальных рядов Лорана. Пусть V — произвольное комплексное векторное пространство и $V[[\zeta, 1/\zeta]]$ — пространство всех формальных рядов Лорана с коэффициентами из V . Для $f(\zeta) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} b_n \zeta^n \in V[[\zeta, \frac{1}{\zeta}]]$ мы полагаем $\oint f(\zeta) d\zeta = 2\pi i b_{-1}$.

Теорема 3. Пусть выполнены условия теоремы 1, $\mathcal{E}_T(\zeta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!T^n}{\zeta^{n+1}}$ — формальное преобразование Лапласа–Бореля резольвенты Фредгольма оператора T и $\mathcal{E}_T(\zeta - z)$ — следующий формальный ряд по степеням $1/\zeta$:

$$\mathcal{E}_T(\zeta - z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!T^n}{\zeta^{n+1}} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{z}{\zeta} \right)^j \right)^{n+1}.$$

Тогда произведение $\mathcal{E}_T(\zeta - z)g(\zeta)$ корректно определено как элемент пространства $E[[z]][[\zeta, 1/\zeta]]$ и

$$w(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint \mathcal{E}_T(\zeta - z)g(\zeta) d\zeta,$$

где интеграл в правой части равенства понимается как формальный интеграл в пространстве формальных рядов Лорана.

1. Хилле Э., Филлипс Р. Функциональный анализ и полугруппы. — Москва: Изд-во иностр. лит., 1962. — 829 с.
2. Крейн С. Г. Линейные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве. — Москва: Наука, 1967. — 467 с.
3. Далецкий Ю. Л., Крейн М. Г. Устойчивость решений дифференциальных уравнений в банаховом пространстве. — Москва: Наука, 1970. — 536 с.
4. Горбачук В. И., Горбачук М. Л. Граничные задачи для дифференциально-операторных уравнений. — Киев: Наук. думка, 1984. — 284 с.
5. Arendt W., Batty C. J. K., Hieber M. et al. Vector-valued Laplace transforms and Cauchy problems. — Basel: Birkhäuser, 2001. — 523 p.
6. Сильченко Ю., Соболевский П. Разрешимость задачи Коши для эволюционного уравнения в банаховом пространстве с неплотно заданным операторным коэффициентом, порождающим полугруппу с особенностью // Сиб. мат. журн. — 1986. — **27**, № 4. — С. 93–104.
7. Da Prato G., Sinestrati E. Differential operators with non dense domain // Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa. — 1987. — **14**. — P. 285–344.
8. Власенко Л. А. Эволюционные модели с неявными и сингулярными дифференциальными уравнениями. — Днепрпетровск: Системные технологии, 2006. — 273 с.
9. Горбачук М. Л. Про аналітичні розв'язки диференціально-операторних рівнянь // Укр. мат. журн. — 2000. — **52**, № 5. — С. 596–607.
10. Gorbachuk M., Gorbachuk V. On the well-posed solvability in some classes of entire functions of the Cauchy problem for differential equations in a Banach space // Methods Funct. Anal. Topology. — 2005. — **11**, No 2. — P. 113–125.
11. Balsler W., Duval A., Malek S. Summability of formal solutions for abstract Cauchy problems and related convolution equations // Ulmer Seminare über Funktionalanalysis und Differentialgleichungen. — 2007. — **11**. — P. 29–44.
12. Gefter S., Stulova T. On holomorphic solutions of some implicit linear differential equation in a Banach space // Operator Theory: Advances and Applications. — Basel: Birkhäuser, 2009. — Vol. 191. — P. 331–340.

13. Баб'як-Білецька Л., Горбачук О. Прямая асимптотична задача для еволюційного рівняння з неоднорідною частиною у вигляді многочлену // *Мат. студії*. – 2000. – **23**, № 1. – С. 84–91.
14. Gefter S., Stulova T. On entire solutions of some inhomogeneous linear differential equations in a Banach space // *Proceedings of the 3rd Nordic EWM Summer School for PhD Students in Mathematics*. – TUCS General Publication, Turku, 2009. – No 53. – P. 211–214.
15. Gorbachuk V. I., Gorbachuk V. M. On holomorphic solutions of some inhomogeneous linear differential equations in a Banach space over a non-Archimedean field // *p-Adic Numbers, Ultrametric Analysis and Applications*. – 2010. – **2**, No 2. – P. 114–121.

*Харьковский национальный университет
им. В. Н. Каразина*

Поступило в редакцию 28.12.2011

С. Л. Гефтер, Т. Є. Стулова

**Про коректність деякого нерезонансного
операторно-диференціального рівняння в просторі цілих функцій
експоненціального типу**

Нехай E — банахів простір і A — замкнений лінійний оператор в E з областю визначення, що може не бути щільною в просторі E . Ми вважаємо, що оператор A має обмежений обернений оператор і доводимо коректність диференціального рівняння $w' = Aw + f(z)$ у спеціальному просторі цілих функцій.

S. L. Gefter, T. E. Stulova

**On the well-posedness of some nonresonant operator differential
equations in a space of entire functions of exponential type**

Let E be a Banach space, and let A be a closed linear operator on E with the domain of definition that may be not dense in E . We suppose that A has a bounded inverse operator and prove the well-posedness of the differential equation $w' = Aw + f(z)$ in a special space of entire functions.

Академик НАН Украины А. М. Ковалев, В. Н. Неспирный,
А. С. Суйков

Существование функции со знакопостоянной производной для автономных систем дифференциальных уравнений

Для автономной системы дифференциальных уравнений при условии выполнения условий существования и единственности решений в окрестности стационарной точки доказано существование функции, производная которой в силу системы является знакопостоянной. При доказательстве использованы результаты Н. Н. Красовского и Х. Л. Массеры.

Появление дополнительных функций [1, 2] внесло конструктивный элемент в теорию устойчивости движения, связанный с процедурой построения функций Ляпунова. Исходным этапом в построении функции Ляпунова стало получение функции, имеющей знакопостоянную производную в силу системы, которая затем преобразуется к виду, когда множество обращения в ноль ее производной является инвариантным. Преобразованная функция позволяет решать все задачи устойчивости, включая и частичную устойчивость [3]. Учитывая важность такой функции, встал вопрос о ее существовании, который тесно связан с задачей о существовании функции со знакоопределенной производной, поставленной и решенной Н. Н. Красовским [4]. Опираясь на результаты Н. Н. Красовского [4] и Х. Л. Массеры [5], в настоящей работе доказана теорема о существовании функции, имеющей знакопостоянную производную.

1. Постановка задачи. Будем рассматривать автономную систему дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = \frac{dx}{dt} = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n, \quad f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n, \quad f \in C, \quad f(0) = 0. \quad (1)$$

Для произвольной функции $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ через $\dot{g} = \langle \nabla g, f \rangle$ будем обозначать производную этой функции вдоль произвольной траектории системы (1). Здесь $\langle \cdot, \cdot \rangle$ означает скалярное произведение в \mathbb{R}^n . Кроме того, введем обозначения $B(x_0, \varepsilon) = \{x: |x - x_0| < \varepsilon\}$ — окрестность точки x_0 радиуса ε , $x(t; x_0)$ — решение системы (1), удовлетворяющее начальному условию $x(0) = x_0$.

Рассмотрим вопрос о существовании функции $V(x)$, производная которой в силу системы (1) является знакопостоянной функцией. Следующая теорема дает положительный ответ на этот вопрос, и ее доказательство определяет некоторый способ построения искомой функции.

Теорема 1. Пусть для системы (1) в некоторой области M выполнены условия существования и единственности решений. Если в любой окрестности начала координат $B_\varepsilon \subset M$, существует точка $x_0 \in B_\varepsilon$ такая, что решение $x(t; x_0)$ в некоторый момент времени T (возможно $T < 0$) покидает множество M , т. е. $x(T, x_0) \notin M$, то существует непрерывная функция V , не равная нулю тождественно, производная \dot{V} которой в силу системы (1) непрерывна и отрицательно постоянна на множестве M .

2. Классификация траекторий автономной системы. Зафиксируем число r и будем рассматривать окрестность нуля

$$M = B(0, r) = \{x: |x| \leq r\}, \quad (2)$$

а также множество

$$M^\varepsilon = B(0, r + \varepsilon_0) = \{x: |x| < r + \varepsilon_0\}, \quad \varepsilon_0 > 0. \quad (3)$$

Разобьем M на подмножества согласно характеру поведения траекторий:

$$\begin{aligned} M_1 &= \{x_0 \in M: \exists t_1 \leq 0, \varepsilon_0 > 0: x(t_1 - \varepsilon) \notin M \forall \varepsilon < \varepsilon_0, x(t; x_0) \in M \forall t > t_1, \\ &\quad \lim_{t \rightarrow +\infty} x(t; x_0) = 0\}, \\ M_2 &= \{x_0 \in M: \exists t_2 \geq 0, \varepsilon_0 > 0: x(t_2 + \varepsilon) \notin M \forall \varepsilon < \varepsilon_0, x(t; x_0) \in M \forall t < t_2, \\ &\quad \lim_{t \rightarrow -\infty} x(t; x_0) = 0\}, \\ M_3 &= \{x_0 \in M: \exists t_1 \leq 0, t_2 \geq 0, t_1 \neq t_2, \varepsilon_0 > 0: x(t_1 - \varepsilon; x_0) \notin M, \\ &\quad x(t_2 + \varepsilon, x_0) \notin M, \forall \varepsilon < \varepsilon_0, x(t; x_0) \in M, \forall t: t_1 \leq t \leq t_2\}, \\ M_0 &= M \setminus M_{123}, \quad M_{123} = M_1 \cup M_2 \cup M_3. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь множества M_i , $i = \overline{1, 3}$, совпадают с одноименными множествами, определенными в работе [4]. Однако в отличие от случая Красовского, множество M_0 (содержащее целые траектории или полутраектории, целиком лежащие в M) может быть непусто.

Введем также обозначения для границы множества M :

$$M^* = \partial M = \{x: |x| = r\}, \quad M_i^* = M_i \cap M^*.$$

Множества M_i , очевидно, инвариантны. Точную структуру множества M_0 не всегда просто определить, однако легко показать, что M_0 принадлежат траектории, полностью лежащие в M .

3. Построение функции. Учитывая результаты Массеры [5] и Красовского [4], можно предложить следующий вид функции V :

$$V(x) = \gamma(x)V_0(x), \quad V_0(x_0) = \begin{cases} 0, & x_0 \in M_0, \\ \int_0^{+\infty} G(|x(t; x_0)|) dt, & x_0 \in M_1, \\ \int_{-\infty}^0 G(|x(t; x_0)|) dt, & x_0 \in M_2, \\ \int_0^0 G(|x(t; x_0)|) dt, & x_0 \in M_3. \end{cases} \quad (5)$$

Здесь $T(x) = (t_1 + t_2)/2$, где $t_1 > 0$, $t_2 < 0$ — моменты времени, когда траектория достигает M^* . Согласно [4], функция $V_0(x)$ непрерывна на M_{123} , а ее производная $\dot{V}_0(x)$ положительно определена на M_{123} . Это означает, что $\dot{V}_0(x) \geq 0$ на M . Функция $\gamma(x)$, определенная

на всем множестве M , должна выбираться так, чтобы функция V оставалась непрерывной на M , а \dot{V} — положительно постоянной. То есть $\gamma(x)$ предназначена для сглаживания возможных разрывов функции $V_0(x)$ без потери других требуемых свойств. В тривиальном случае $M_0 = \{0\}$ достаточно взять $\gamma(x) \equiv 1$, однако в случае более сложного M_0 такой выбор не может гарантировать непрерывности.

Введем функцию $\bar{\gamma}$, определенную на M^* :

$$\begin{aligned} \bar{\gamma}(x) &: M^* \rightarrow \mathbb{R}; & \bar{\gamma} &\in C^1, \\ \bar{\gamma}(x) = \nabla \bar{\gamma}(x) &= 0 & \text{при} & \quad x \in M_0^*, \\ \bar{\gamma}(x) &\geq 0 & \text{при} & \quad x \in M_1^* \cup M_2^* \cup M_3^*, \\ \bar{\gamma}(x(t_1, x_0)) &= \gamma(x(t_2, x_0)) & \forall x_0 &\in M_3, \end{aligned} \tag{6}$$

и определим

$$\gamma(x_0) = \begin{cases} 0, & x_0 \in M_0, \\ \bar{\gamma}(x(t_1; x_0)), & x_0 \in M_1, \\ \bar{\gamma}(x(t_2; x_0)), & x_0 \in M_2, \\ \bar{\gamma}(x(t_1, x_0)) = \bar{\gamma}(x(t_2, x_0)), & x_0 \in M_3, \end{cases} \tag{7}$$

где $t_1 > 0$, $t_2 < 0$ — моменты времени, когда траектория достигает границы множества M .

Для доказательства основной теоремы потребуются следующие вспомогательные утверждения.

Утверждение 1. Пусть $f_1, f_2: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ и пусть $x_0 \in \mathbb{R}^n$. Если f_1 непрерывна в x_0 и $f_1(x_0) = 0$, а f_2 ограничена в некоторой окрестности x_0 , то $f_1 f_2$ непрерывна в x_0 .

Доказательство. Пусть $B(x_0, r)$ — окрестность x_0 и $|f_2(x)| \leq m$ при $x \in B(x_0, r)$. Непрерывность f_1 в x_0 значит, что $\forall \epsilon > 0 \exists \delta > 0: |f_1(x) - f_1(x_0)| < \epsilon$ при $|x - x_0| < \delta$. Но тогда

$$|f_1(x)f_2(x) - f_1(x_0)f_2(x_0)| \leq m|f_1(x) - f_1(x_0)| < m\epsilon$$

при тех же x , что и означает непрерывность $f_1 f_2$ в точке x_0 .

Утверждение 2 (непрерывность траекторий). Пусть для системы (1) известно решение $x(t; x_0)$, $0 \leq t \leq T$, и пусть в некоторой окрестности

$$D = \{x: \min_{0 \leq t \leq T} |x - x(t; x_0)| < d\}$$

выполнены условия существования и единственности решений системы (1). Тогда

$$\forall \epsilon \in (0, d) \quad \exists \delta > 0: \quad x_* \in B(x_0, \delta) \Rightarrow |x(t; x_*) - x(t; x_0)| < \epsilon \quad \text{при} \quad 0 \leq t \leq T.$$

Для доказательства используется непрерывная зависимость решений (1) от начальных условий в обычной формулировке.

Утверждение 3. Множество M_{123} открыто в M , т. е. если $x_0 \in M_{123}$ и $B(x_0, \epsilon) \subset M$ для некоторого ϵ , то $B(x_0, \epsilon) \subset M_{123}$.

Доказательство. По определению M_{123} , существует отрезок траектории $x(t; x_0)$, лежащий в M при $0 \leq t \leq t^*$ (либо $t^* \leq t \leq 0$), для которого $x(t + \delta; x_0) \notin M$ для некоторого

малого δ . M замкнуто, поэтому существует $q: B(x(t^*; x_0), q)$. Но тогда из утверждения 2 следует, что существует $B(x_0, \varepsilon): x(x', t') \in B(x(t^*; x_0), q)$ для любого $x' \in B(x_0, \varepsilon)$ при соответствующем выборе t' .

Утверждение 4. Пусть $\{x_i\}$, $x_i \in M_{123}$, — сходящаяся последовательность,

$$\lim_{i \rightarrow \infty} x_i = x_0, \quad x_0 \notin M_{123}, \quad x_0 \neq 0.$$

Тогда

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \gamma(x_i) = 0. \quad (8)$$

Доказательство. Поскольку $\{x_i\} \subset M_{123}$, то для каждого x_i существует точка $x_i^* = x(t^*; x_i) \in M_{123}^*$, а если $x_i \in M_3$, то кроме x_i^* существует также вторая точка x_i^{**} и момент времени t^{**} с такими же свойствами. Рассмотрим последовательность X^* , составленную из точек x_i^* и, для тех i , для которых они существуют, x_i^{**} , и соответствующую последовательность T моментов времени t^* и t^{**} .

Выберем произвольную сходящуюся подпоследовательность $\{x_{i_k}^*\}$ из X^* ,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x_{i_k}^* = x_0^*,$$

и соответствующую ей подпоследовательность $\{t_{i_k}\}$ из T . Из непрерывной зависимости от начальных условий следует, что существует конечный либо бесконечный предел t_{i_k} .

Пусть $\lim t_{i_k} = t^*$, т.е. предел конечный. Тогда

$$x_0 = \lim x_i = \lim x(-t_i^*; x_i^*) = \lim x(-t^*; x_i^*) = x(-t^*; x_0^*);$$

здесь использована непрерывная зависимость $x(t; x_0)$ сначала по t , затем по x . Но поскольку $x_0 \notin M_{123}$ и $x_0 = x(-t^*; x_0^*)$, то $x_0^* \notin M_{123}^*$.

Пусть $\lim t_{i_k} = +\infty$ или $\lim t_{i_k} = -\infty$. Тогда x_0 является предельной точкой, к которой стремятся траектории $x(t; x_i)$. Но поскольку $x_i \in M_{123}$, то такой предельной точкой может быть только $x_0 = 0$.

Утверждение 5. Функция γ непрерывна в $M \setminus \{0\}$.

Доказательство. Рассмотрим произвольную последовательность $\{x_i\} \in M$,

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \{x_i\} = x_0 \neq 0,$$

и покажем, что

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \gamma(x_i) = \gamma(x_0). \quad (9)$$

1. Пусть $\gamma(x_0) \neq 0$. Тогда из (7) следует, что $x_0 \in M_{123}$ и $\exists x_0^*$. Поскольку M_{123} открыто, то $\exists N: \forall i > N x_i \in M_{123}$, и $\forall i > N \exists x_i^*$. Из непрерывности траектории $x(t; x_0)$ получаем, что $\exists \lim_{i \rightarrow \infty} x_i^* = x_0^*$. Поскольку $\bar{\gamma}$ непрерывна, то

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \bar{\gamma}(x_i^*) = \gamma(x_0^*),$$

что с учетом формулы (7) означает (9).

2. Пусть $\gamma(x_0) = 0$ и $\exists N: \forall i > N \ x_i \notin M_{123}$. Тогда $\gamma(x_i) = 0$ при $i > N$ и, следовательно, (9) выполнено.

3. Пусть $\gamma(x_0) = 0$ и $\forall N > 0 \exists i > N: x_i \in M_{123}$. Выделим из последовательности $\{x_i\}$ подпоследовательности $\{x_i^M\} \in M_{123}$ и $\{x_i^0\} \notin M_{123}$. Поскольку $\gamma(x_i^0) = 0$, то сходимость всей последовательности определяется сходимостью подпоследовательности $\gamma(\{x_i^M\})$. Согласно утверждению 4

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \gamma(x_i^M) = 0,$$

а следовательно, (9) имеет место.

Утверждение 6. *Функция γ , определенная формулой (7), существует для любой системы вида (1) в заданной области M в предположении, что в M выполнены условия существования и единственности решений.*

Доказательство. Существование и единственность решений в M означают существование разбиения (4). В таком случае функция γ будет определена в любой точке M , если определена функция $\bar{\gamma}$ на границе M .

Для того чтобы определить $\bar{\gamma}$, рассмотрим границу M^* . Это гладкое многообразие в \mathbb{R}^n , следовательно, его можно рассматривать как риманово многообразие с метрикой $d(\cdot, \cdot)$. Пусть

$$\bar{\gamma}: M^* \rightarrow \mathbb{R}, \quad \bar{\gamma}(x) = \min_{x' \in M_0^*} d(x, x'). \quad (10)$$

Множество M_0 замкнуто (утверждение 3), поэтому минимум всегда достигается. Естественная метрика d непрерывна на M^* , поэтому и $\bar{\gamma}(x)$ является непрерывной функцией.

Отметим, что (10) является лишь одним из возможных способов построить $\bar{\gamma}$, однако он применим для произвольной системы с указанными свойствами и позволяет доказать существование $\bar{\gamma}$.

Доказательство основной теоремы. Выберем области (2) и (3) таким образом, чтобы условия существования и единственности решений (1) выполнялись в M^ε . Это заведомо можно сделать за счет выбора числа r . Разобьем область M на M_i , $i = \overline{0, 3}$. Построим функцию V_0 в виде (5); согласно [4], это возможно. Воспользовавшись утверждением (6), построим функцию γ в области M .

Запишем функцию V в виде (5). Докажем, что она непрерывна вместе со своей производной на M .

Поскольку $\gamma(x) \geq 0$ и $\dot{\gamma}(x) = 0$ при $x \in M$ по построению, то $\dot{V}(x) \geq 0$, и остается показать, что функция $V(x) = \gamma(x)V_0(x)$ является непрерывной в M .

Функция V_0 ограничена на M и непрерывна на M_{123} ; кроме того, $V_0(0) = 0$. Функция $\gamma(x)$ ограничена на M , непрерывна на $M \setminus \{0\}$, и $\gamma(x) = 0$ при $x \in M_0$. Следовательно, согласно 1, $V(x)$ непрерывна на M .

Производная в силу системы (1)

$$\dot{V}(x) = \gamma(x)\dot{V}_0(x) + \dot{\gamma}(x)V_0(x) = \gamma(x)\dot{V}_0(x), \quad (11)$$

поскольку $\gamma(x)$ постоянна вдоль траекторий системы (1), а следовательно, $\dot{\gamma}(x) = 0$. Функция $\dot{V}_0(x)$ также непрерывна на M_{123} , $\dot{V}_0(0) = 0$, поэтому согласно утверждению 1 $\dot{V}(x)$ непрерывна на M .

Поскольку $\gamma(x) \geq 0$ и $\dot{V}(x) \geq 0$, то из (11) следует $\dot{V}(x) \geq 0$. Таким образом, теорема доказана.

1. Ковалев А. М. Построение функции Ляпунова со знакоопределенной производной для систем, удовлетворяющих теореме Барбашина–Красовского // Прикл. математика и механика. – 2008. – **72**, вып. 2. – С. 266–272.
2. Ковалев А. М., Суйков А. С. Функции Ляпунова для систем, удовлетворяющих условиям теоремы Барбашина–Красовского // Доп. НАН України. – 2008. – № 12. – С. 22–27.
3. Ковалев А. М. Решение задач устойчивости для нелинейных систем с известной функцией со знаком постоянной производной // Механика твердого тела. – 2009. – Вып. 32. – С. 3–28.
4. Красовский Н. Н. Об обращении теорем А. М. Ляпунова и Н. Г. Четаева о неустойчивости для стационарных систем дифференциальных уравнений // Прикл. математика и механика. – 1954. – **18**, вып. 5. – С. 513–532.
5. Massera J. L. On Liapounoff's conditions of stability // Ann. Math. Second Series. – 1949. – **50**, No 3. – P. 705–721.

*Институт прикладной математики
и механики НАН Украины, Донецк*

Поступило в редакцию 26.01.2012

Академік НАН України **О. М. Ковальов, В. М. Неспірний, О. С. Суйков**

Існування функцій зі знакосталою похідною для автономних систем диференціальних рівнянь

Для автономної системи диференціальних рівнянь, що задовольняє умови існування та єдиності розв'язків в околі стаціонарної точки, доведено існування функції, похідна якої внаслідок системи є знакосталою. При доведенні використані результати М. М. Красовського та Х. Л. Массери.

Academician of the NAS of Ukraine **A. M. Kovalev, V. N. Nesporny, A. S. Suykov**

Existence of a function with constant-sign derivative for autonomous systems of differential equations

For an autonomous system of differential equations satisfying the conditions of existence and uniqueness of solutions in a vicinity of the stationary point, the existence of a function with constant-sign derivative along trajectories of the system is proven. In the proof, Krasovskii's and Massera's results are used.

Я. В. Лавренюк

Про незвідні системи твірних у групах автоморфізмів кореневих дерев

(Представлено академіком НАН України М. О. Перестюком)

Досліджено існування незвідних систем твірних для деяких груп та класів груп автоморфізмів кореневих дерев. Зокрема, доведено, що група всіх бієктивних автоматних перетворень та група бієктивних скінченно-автоматних перетворень над довільним алфавітом, що містить хоча б дві літери, мають незвідні системи твірних.

У роботі досліджується така проблема.

Проблема 1. Чи мають незвідні системи твірних групу всіх бієктивних автоматних перетворень та групу бієктивних скінченно-автоматних перетворень над довільним алфавітом, що містить хоча б дві літери?

Вперше таку проблему поставили В. Csákány та F. Gécseg [1] в 1965 р. Це питання як відкрита проблема формулювалося також Р. Dömösi, зокрема, в роботах [2, проблема 2.1] та [3, проблема 2.31]. Також ця проблема згадується в роботах [4, 5].

У роботі [6] автором анонсовано розв'язання проблеми 1 для випадку групи всіх бієктивних автоматних перетворень над алфавітом, що містить дві літери.

У даному повідомленні доводиться існування незвідних систем твірних для деяких груп та класів груп автоморфізмів кореневих дерев. Зокрема, дано позитивну відповідь на проблему 1.

Спочатку нагадаємо визначення кореневого дерева та деяких груп, що діють на кореневих деревах.

Нехай $X = (X_1, X_2, \dots)$ — послідовність скінченних множин $X_i = \{0, 1, \dots, n_i\}$ ($n_i \geq 1$ для всіх i). X^n — множина всіх слів вигляду $x_1x_2 \dots x_n$, де $x_i \in X_i$, $i = 1, \dots, n$. X^* — множина всіх скінченних слів вигляду $x_1x_2 \dots x_n$, де $x_i \in X_i$. X^ω — множина всіх нескінченних слів вигляду $x_1x_2 \dots$, де $x_i \in X_i$. Також вважаємо, що порожнє слово \emptyset міститься в X^* . Множину слів X^* можна розглядати як кореневе дерево T_X : вершина $x_1x_2 \dots x_n$ суміжна з вершиною $x_1x_2 \dots x_{n-1}$, \emptyset — корінь. Визначимо також піддерево T_v для $v \in X^*$, вершинами якого є слова вигляду vX^* . Рівнем номер n називається множина вершин X^n .

Нехай $\text{Aut } T_X$ — група всіх автоморфізмів дерева T_X . Зауважимо, що $\text{Aut } T_X$ можна отождентити з $\text{Aut } X^\omega$. Нехай $G < \text{Aut } T_X$. Нагадаємо визначення стандартних підгруп групи G :

Підгрупа всіх автоморфізмів, що фіксують всі вершини рівня номер n , позначається $\text{St}_G(n)$ і називається *стабілізатором рівня*.

Якщо $v \in X^*$, то множина всіх автоморфізмів, які фіксують кожну вершину зовні піддерева T_v , називається *вершинною групою* (чи *жорстким стабілізатором вершини*) і позначається $\text{rist}_G(v)$.

Група, породжена множиною $\bigcup_{v \in X^n} \text{rist } v$, називається *жорстким стабілізатором рівня* номер n і позначається $\text{Rist}_G(n)$.

Незліченні групи з незвідними системами твірних. Нагадаємо, як визначаються деякі класи автоморфізмів T_X .

Автоморфізм g називається *слабко фінітарним*, якщо для довільного $w \in X^\omega$ існують такі $n \in \mathbb{N}$, $u \in X^n$, $v \in X^\omega$, що виконуються рівності $w = uv$ та $g(uv) = g(u)v$.

Два слова $w_1, w_2 \in X^\omega$ називаються *конфінальними*, якщо існують такі $n \in \mathbb{N}$, $u_1, u_2 \in X^n$, $v \in X^\omega$, що $w_1 = u_1v$ і $w_2 = u_2v$.

Автоморфізм g називається *конфінальним*, якщо він конфінальні слова переводить у конфінальні.

Нагадаємо тепер, як визначаються деякі підгрупи $\text{Aut } T_X$:

Група $\text{Aut}_{wf} T_X$ — група всіх слабко фінітарних автоморфізмів.

Група $\text{Aut}_b T_X$ — група всіх біконфінальних автоморфізмів. Складається зі всіх конфінальних автоморфізмів $\text{Aut } T_X$, обернені до яких теж є конфінальними.

Зауважимо, що з визначень цих груп одразу випливають включення

$$\text{Aut}_{wf} T_X < \text{Aut}_b T_X.$$

Більш детально ці групи описано, наприклад, в [7].

Теорема 1. *Нижченаведені групи мають незвідні системи твірних:*

група всіх автоморфізмів $\text{Aut } T_X$;

група слабко фінітарних автоморфізмів $\text{Aut}_{wf} T_X$;

група біконфінальних автоморфізмів $\text{Aut}_b T_X$.

Злічені групи з незвідними системами твірних. Далі ми розглядатимемо дерева слів над алфавітом. Тобто вважатимемо, що $X_1 = X_2 = \dots$. У цьому випадку кореневе дерево T_X називається *однорідним*.

В однорідному кореневому дереві T_X кожне піддерево T_v , де $v \in X^n$, може бути природно ототожнене з усім деревом T_X :

$$\pi_v: x_1x_2 \dots x_nx_{n+1} \dots x_m \mapsto x_{n+1}x_{n+2} \dots x_m,$$

де $x_1x_2 \dots x_n = v$.

Таким чином, якщо $g \in \text{St}_{\text{Aut } T_X}(n)$, то дія g на T_v для кожного $v \in X^n$ може бути ототожнена за допомогою π_v з автоморфізмом g_v дерева T_X , визначеного рівністю $\pi_v(u^g) = (\pi_v(u))^{g_v}$. Автоморфізм g_v називається *станом g в v* .

Для кожного $g \in \text{Aut } T_X$ можна записати $g = a_g g_n$, де $g_n \in \text{St}_{\text{Aut } T_X}(n)$, і $a_g \in \text{Aut}_n T_X$. Під станом $g|_v$ елемента g у вершині $v \in X^n$ мається на увазі стан елемента $g_n \in \text{St}_{\text{Aut } T_X}(n)$ у вершині v .

Автоморфізм $g \in \text{Aut } T_X$ називається *скінченно становим* автоморфізмом, якщо множина всіх його станів скінченна. Всі скінченно станові автоморфізми дерева T_X утворюють групу $\text{FAut } T_X$.

Підгрупа G групи $\text{Aut } T_X$ називається *самоподібною*, якщо всі стани елементів G самі є елементами групи G .

Для довільного $g \in \text{Aut } T_X$ визначимо $\Theta_n(g) = \{v \in X^n \mid g|_v \neq e\}$.

Відомо, що для $g \in \text{FAut } T_X$ послідовність може рости лише експоненційно чи поліноміально (див. [8, наслідок 7]).

Нагадаємо тепер, як визначаються деякі підгрупи $\text{Aut } T_X$:

Група $\text{Pol}(m)$ поліноміальних автоматів степеня $m \geq 0$ складається з усіх $g \in \text{FAut } T_X$ таких, що послідовність $\Theta_n(g)$ обмежена поліномом степеня m . Групу $\text{Pol}(0)$ також називають групою обмежених автоматів.

Група $\text{Pol}(\infty)$ поліноміальних автоматів — об'єднання зростаючого ланцюга груп $\bigcup_{m=0}^{\infty} \text{Pol}(m)$.

Група $\text{RAut } T_{\chi}$ функціонально рекурсивних автоморфізмів — об'єднання всіх скінченно породжених самоподібних підгруп групи $\text{Aut } T_{\chi}$.

Більш детально ці групи описано в [8–10].

Теорема 2. *Нижченаведені групи мають незвідні системи твірних:*

група $\text{FAut } T_{\chi}$ скінченно станових автоморфізмів;

група $\text{Pol}(0)$ обмежених автоматів;

група $\text{Pol}(m)$ поліноміальних автоматів степеня $m \in \mathbb{N}$;

група $\text{Pol}(\infty)$ поліноміальних автоматів;

група $\text{RAut } T_{\chi}$ функціонально рекурсивних автоморфізмів.

Зауважимо, що при побудові незвідних систем твірних у доведеннях теорем 1 та 2 використовується існування базису Гамеля векторного простору над полем. Тому в деяких випадках доведення використовують аксіому вибору.

Зауважимо, що група всіх бієктивних автоматних перетворень над скінченним алфавітом ізоморфна групі всіх автоморфізмів однорідного кореневого дерева відповідної валентності, а група скінченно-автоматних перетворень над скінченним алфавітом ізоморфна групі скінченно станових автоморфізмів однорідного кореневого дерева відповідної валентності. Тому проблема 1 розв'язується позитивно:

Теорема 1. *Група всіх бієктивних автоматних перетворень та група бієктивних скінченно-автоматних перетворень над довільним алфавітом, що містить хоча б дві літери, мають незвідні системи твірних.*

1. Чакани К., Гечек Ф. О группе автоматных преобразований // Кибернетика. – 1965. – № 5. – С. 14–17.
2. Dömösi P. Some of my favourite unsolved problems // Unsolved problems on mathematics for the 21st century. – Amsterdam: IOS Press; Tokyo: Ohmsha, 2001. – P. 159–168.
3. Dömösi P., Nehaniv C. L. Algebraic theory of automata networks. An introduction. – Philadelphia, PA: SIAM, 2005. – 265 p.
4. Aleshin S. Automata in algebra // J. Math. Sci. – 2010. – **168**. – P. 14–20.
5. Nekrashevych V. V., Sushchansky V. I. Some problems on groups of finitely automatic permutations // Mat. Stud. – 2000. – **13**, No 1. – P. 93–96.
6. Лавренко Я. В. Про мінімальну систему твірних у групі автоморфізмів бінарного кореневого дерева // Доп. НАН України. – 2012. – № 7. – С. 35–37.
7. Nekrashevych V. V., Sushchansky V. I. On conflinal dynamics of rooted tree automorphisms // Computational and Geometric Aspects of Modern Algebra. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000. – Vol. 275. – P. 229–246.
8. Sidki S. N. Automorphisms of one-rooted trees: growth, circuit structure and acyclicity // J. Math. Sci. – 2000. – **100**, No 1. – P. 1925. – 1943.
9. Brunner A. M., Sidki S. N. On the automorphism group of the one-rooted binary tree // J. Algebra. – 1997. – **195**. – P. 465–486.
10. Sidki S. N. Regular trees and their automorphisms. – Rio de Janeiro: IMPA, 1998. – Vol. 56. – ii+42 p.

Я. В. Лавренюк

**О неприводимых системах образующих в группах автоморфизмов
корневых деревьев**

Исследовано существование неприводимых систем образующих для некоторых групп и классов групп автоморфизмов корневых деревьев. В частности, доказано, что группа всех биективных автоматных преобразований и группа биективных конечно-автоматных преобразований над произвольным алфавитом, содержащим хотя бы две буквы, имеют неприводимые системы образующих.

Ya. V. Lavrenyuk

**On the irreducible systems of generatrices in the automorphism groups
of rooted trees**

The existence of minimal generating systems for some automorphism groups of rooted trees is proved. Particularly, it is proved that the group of all bijective automaton transformations and the group of all finite bijective automaton transformations over a fixed alphabet with at least two elements have the irreducible systems of generatrices.



УДК 531.37:531.396:537.634:537.612.4:519.6

© 2012

С. С. Зуб, член-корреспондент НАН України С. И. Ляшко,
В. С. Ляшко

Об устойчивости орбитального движения двух магнитных тел

Проведен сравнительный анализ современных методов исследования динамики магнитно взаимодействующих тел и представлены новые результаты по исследованию динамики в модели магнитных гантелей. Рассматриваются различные аспекты применения новых теоретико-групповых методов к исследованию устойчивости орбитального движения двух магнитных тел. Обсуждается предложенная авторами методика исследования устойчивости магнитных систем, включающая в себя: численное моделирование гамильтоновых уравнений движения, метод Монте-Карло заполнения фазового объема, процедуры статистической обработки данных, полученных в результате численного эксперимента.

Данная работа посвящена анализу орбитальных движений в системах магнитно взаимодействующих тел, предложенных в работах [1–5]. В этих работах для исследования траекторий нами применялись как аналитические методы, так и методы физической кибернетики [6].

Существует два исторических аспекта рассматриваемой проблемы. Первый связан с нахождением потенциальной энергии взаимодействия, приводящей к замкнутым орбитам при любых начальных условиях в задаче двух тел. Эта задача была поставлена еще Ньютоном и решена Бертраном, Дарбу и Альфеном во второй половине XIX века. Однако уже в первой половине XX века в другой постановке эта задача возникла в ядерной физике как “проблема $-1/r^3$ ” [7]. Различный вклад в ее решение внесли Гейзенберг, Тамм, Гинзбург и Козорез [8]. Если снять некоторые ограничения, например требование замкнутости, произвольности начальных условий, то можно говорить об устойчивых квазипериодических¹ движениях в смысле ограниченности траектории объемом некоторого тора с заданным поперечным сечением.

Гейзенбергу принадлежит идея об учете пространственной протяженности частицы или “учете реакции собственного поля частицы” [8]. Связанная с этим идея “тесных” магнитных конфигураций привела к появлению модели взаимодействия двух “магнитных ганте-

¹“Период” — время между двумя последовательными пересечениями плоскости, поперечной движению, например, плоскость xz .

лей”, которая, пожалуй, является наиболее простой магнитной конфигурацией с магнитной потенциальной энергией, не подчиняющейся закону обратных кубов. По всей видимости, первым в такой постановке эту задачу рассмотрел В. В. Козорез.

Сформулированные им условия устойчивости орбитального движения, как мы сегодня знаем [4], нельзя признать достаточными, но именно его пионерские работы дали толчок для более глубокого и всестороннего исследования “тесных” магнитных конфигураций.

Второй аспект относится к разработке математического аппарата исследования динамики гамильтоновых систем.

Над созданием теоретических основ гамильтонового формализма для твердого тела работали как физики, так и математики. Среди них такие известные имена, как Вольфганг Паули [9] и Софус Ли, а также Б. Констант, Дж.-М. Сурьо, А. А. Кириллов, В. И. Арнольд, Дж. Е. Марсден [10]. Различные подходы к гамильтоновой динамике твердого тела в рамках пуассоновых структур (ПС) для широкого круга задач разрабатываются, например, в работах А. В. Борисова и И. С. Мамаева [11].

Новая постановка задачи — о возможности орбитальных движений в “тесных” магнитных системах — потребовала нового математического аппарата.

В работе [3] приводится обзор существующих вариантов гамильтонового формализма, обсуждаются причины, по которым они не применимы для описания динамики магнитно взаимодействующих твердых тел.

Основой для получения гамильтонового формализма магнитно взаимодействующих тел для достаточно широкого класса систем, включающих как постоянные магниты, так и сверхпроводящие элементы, послужила работа [12].

Предложенный нами гамильтонов формализм [2, 3] на основе пуассоновых структур позволил дать алгебраическое бескоординатное описание динамики магнитно взаимодействующих осесимметричных твердых тел, а также применить новые теоретико-групповые методы к исследованию устойчивости в рассматриваемой задаче и значительно упростил как процесс создания математической модели, так и ее численное исследование [5].

Исследованию устойчивости в динамических системах посвящен ряд современных работ [5, 13, 14]. Используемые в них методы можно формально разделить на три класса, а именно, аналитические, качественные и численный эксперимент.

Аналитические методы дают необходимые и достаточные условия устойчивости для реализуемых орбит в явном виде. Качественные методы, как правило, дают ответы на такие вопросы как количество положений равновесия, существование устойчивых решений и периодических траекторий и т. д. Большинство качественных методов, относящихся к анализу устойчивости динамических систем, является развитием метода Ляпунова.

Численный эксперимент не является альтернативой аналитическим и качественным методам, но позволяет проводить поисковые исследования, когда применение указанных методов представляют трудности, а также дает возможность извлекать дополнительную информацию о системе, если даже имеется информация аналитического и качественного характера. С философской точки зрения никакой эксперимент — ни численный, ни реальный — не может доказать устойчивость. Он может только дать определенные доводы в пользу устойчивости. На практике же мы наблюдаем комбинирование этих методов исследования. Рассматриваемая нами система является гамильтоновой, т. е. понятие асимптотической устойчивости к ней не применимо. Следовательно, ряд качественных методов [13], которые успешно применяются для исследования задач нелинейной динамики, не могут быть напрямую использованы для исследования магнитно взаимодействующих тел. Основная

масса аналитических результатов по устойчивости гамильтоновых систем относится к случаю симплектических многообразий, но есть работа [15], относящаяся к более сложному для анализа случаю пуассоновых структур. Именно теорема из этой работы используется в нашей статье [4] для доказательства устойчивости орбитального движения. Отметим, что в силу теоретико-групповых свойств, теорема требует доказать выполнение необходимых и достаточных условий только в одной точке орбиты.

В нашем случае пуассоновым многообразием является прямое произведение евклидовых пространств:

$$P = R_x^3 \times R_p^3 \times R_\mu^3 \times R_m^3 \times R_\nu^3 \times R_n^3. \quad (1)$$

Таким образом, образующими нашей динамической системы будут: x_i — относительные координаты двух тел; p_i — компоненты импульса относительного (орбитального движения); m_i — компоненты моментов импульса 1-го и n_i — 2-го тела; μ_i и ν_i — компоненты направляющих ортов осей симметрии 1-го и 2-го тел соответственно.

Ненулевые скобки Пуассона между образующими на P имеют вид:

$$\begin{cases} \{x_i, p_j\} = \delta_{ij}; \\ \{m_i, \mu_j\} = \varepsilon_{ijk}\mu_k; & \{m_i, m_j\} = \varepsilon_{ijk}m_k; \\ \{n_i, \nu_j\} = \varepsilon_{ijk}\nu_k; & \{n_i, n_j\} = \varepsilon_{ijk}n_k, \end{cases} \quad (2)$$

а остальные определяющие скобки Пуассона равны 0.

Функциями Казимира данной пуассоновой структуры, как легко проверить, будут $\vec{\mu}^2 = 1$, $\vec{\nu}^2 = 1$, $(\vec{\mu}, \vec{m}) = M_3 = \text{const}_1$, $(\vec{\nu}, \vec{n}) = N_3 = \text{const}_2$.

Ограничение рассмотрением симметричных волчков позволяет использовать единую декартову систему отсчета, причем компоненты векторных физических величин становятся удобными образующими для пуассоновой структуры.

Гамильтониан системы имеет вид:

$$h = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{\alpha}{2}\vec{m}'^2 + \frac{\beta}{2}\vec{m}''^2 + U(r, c', c'', c'''), \quad (3)$$

где \vec{r} ($r = |\vec{r}|$, $\vec{e} = \vec{r}/r$); \vec{p} — орбитальные координаты и импульсы; $\vec{\nu}'$, \vec{m}' — ось симметрии и момент импульса 1-го тела, $\vec{\nu}''$, \vec{m}'' — 2-го, соответственно; $m = m_1m_2/(m_1 + m_2)$ — приведенная масса двух тел; $\alpha = \beta = 1/I_\perp$ ($I_1 = I_2 = I_\perp$ — главные моменты инерции тел); $c' = (\vec{e}, \vec{\nu}')$, $c'' = (\vec{e}, \vec{\nu}')$, $c''' = (\vec{\nu}', \vec{\nu}'')$.

В этом случае уравнения движения записываются в векторном виде [3]:

$$\begin{cases} \dot{\vec{r}} = \frac{1}{m}\vec{p}; \\ \dot{\vec{p}} = -\partial_r U \vec{e} - \frac{1}{r}(\partial_{c'} U P_\perp^e(\vec{\nu}') + \partial_{c''} U P_\perp^e(\vec{\nu}'')); \\ \dot{\vec{\nu}}' = \alpha'(\vec{m}' \times \vec{\nu}'); \\ \dot{\vec{m}}' = \partial_{c'} U (\vec{e} \times \vec{\nu}') - \partial_{c''} U (\vec{\nu}' \times \vec{\nu}''); \\ \dot{\vec{\nu}}'' = \alpha''(\vec{m}'' \times \vec{\nu}''); \\ \dot{\vec{m}}'' = \partial_{c''} U (\vec{e} \times \vec{\nu}'') + \partial_{c'''} U (\vec{\nu}' \times \vec{\nu}''), \end{cases} \quad (4)$$

где $P_\perp^e(\vec{\nu}') = (\vec{\nu}' - c'\vec{e})$ — проектор на плоскость, перпендикулярную вектору \vec{e} .

Особую роль в вопросах устойчивости орбитальных движений играют так называемые “относительные равновесия” [10], т. е. такие траектории динамики системы, которые одновременно являются однопараметрическими подгруппами группы инвариантности системы.

Устойчивость формулируется относительно некоторой подгруппы G' (в нашем случае это подгруппа вращений вокруг заданной оси) [15, с. 176]. Для этого вводят “трубчатую” окрестность устойчивой орбиты, т. е. такую, что она вся состоит из орбит подгруппы G' . Тогда траектория системы, начинающаяся в некоторой окрестности точки устойчивой орбиты, не должна покидать данную трубчатую окрестность.

Для доказательства устойчивости орбитального движения в задаче двух цилиндрических магнитов [1–4] была использована теорема 4.8 работы [15]. Данная теорема включает условия топологического, алгебраического и аналитического характера. Чтобы сформулировать аналитические условия, вводится набор интегралов движения C_1, C_2, \dots, C_n и конструируется некоторая целевая функция из гамильтониана и интегралов движения, включая компоненту момента. Затем мы должны установить положительную (или отрицательную) определенность целевой функции относительно вариаций переменных из некоторого подпространства.

Специфика применения современных теоретико-групповых методов к исследованию нашей системы состоит в том, что они являются далеко идущими обобщениями теории углового момента, тогда как в нашем случае именно угловой момент и является отображением момента.

Таким образом, в нашем случае те усложнения и тонкости, которые необходимы для перехода от простой модели ко все более общим и сложным, необходимо “спустить вниз” к исходной простой модели действия группы вращения и связанной с этим действием теории углового момента.

При описании цилиндрических магнитов использовалась модель магнитных гантелей [2].

Вводим некоторую декартову систему координат (д. с. к.), связанную с центром масс системы гантелей. В начальный момент времени гантели параллельны друг другу и оси z д. с. к.. Рассмотрим подгруппу вращений вокруг этой оси. Каждая однопараметрическая подгруппа этой группы будет характеризоваться своей угловой скоростью вращения $\vec{\omega} = \omega \vec{e}_z$. Скорость изменения любой физической величины \vec{v} нашей задачи вдоль орбиты данной подгруппы будет задаваться формулой $\dot{\vec{v}} = \vec{\omega} \times \vec{v}$.

Тогда для относительного равновесия в фиксированной точке на орбите должны выполняться соотношения:

$$\vec{x}_0 = r_0 \vec{e}_1; \quad \vec{\mu} = \vec{e}_3; \quad \vec{v} = -\vec{e}_3; \quad \vec{p}_0 = p_0 \vec{e}_2; \quad \vec{m} = m \vec{e}_3; \quad \vec{n} = n \vec{e}_3, \quad (5)$$

где $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ — фиксированный базис.

Таким образом, движение тел происходит по окружности в плоскости xy , оси магнитов параллельны оси z и противоположны по направлению, и все моменты параллельны оси z . Это согласуется с уравнениями движения (4) при данных начальных условиях, а условия (5) сводятся к равенству центростремительной и центробежной силы.

Все условия теоремы, связанные с действиями групп и алгебр Ли на пуассоновом многообразии, выполняются для нашей динамической системы [4].

Получено 10 независимых условий на параметры системы, которые позволяют определить области орбитальной устойчивости в пространстве параметров системы. Найдены точки, в которых условия теоремы выполняются, т. е. множество соответствующих параметров является непустым.

Проведен численный эксперимент по моделированию квазипериодического движения двух тонких и длинных магнитно взаимодействующих цилиндрических тел. Изложена методика исследования устойчивости магнитной системы, включающая в себя: численное моделирование гамильтоновых уравнений движения, метод Монте-Карло (ММК) заполнения фазового объема, процедуры статистической обработки данных, полученных в результате численного эксперимента. Результаты численного эксперимента свидетельствуют об устойчивом характере найденных квазипериодических движений.

Исследуемый вид U -потенциальной энергии взаимодействия (3) описывает достаточно широкий класс парных взаимодействий магнитных тел [12]. Такие системы представляют интерес для физических и технических приложений.

Предложенный вариант гамильтонового формализма удобен как для численного моделирования, так и для исследования устойчивости динамики таких систем.

Найдены относительные равновесия и соответствующие им параметры модели, т. е. аналитически доказано существование устойчивости.

Аналитическое доказательство устойчивости обладает бесспорным преимуществом в силу своей строгости и является, по сути, единственным способом установления устойчивости определенных видов траекторий. Возникающие в виде необходимых и достаточных условий функциональные связи между параметрами системы позволяют определить зоны устойчивости. Однако аналитический подход для сложных систем в силу громоздкости возникающих выражений приводит к невозможности провести анализ до конца аналитическими методами и также требует привлечения численных методов. Кроме того, подход, основанный на свойствах симметрии в гамильтоновых системах, имеет свои ограничения:

- 1) исследуется устойчивость узкого класса траекторий, а именно, так называемые относительные равновесия;
- 2) устойчивость понимается в смысле малых (в пределе бесконечно малых) отклонений от относительного равновесия;
- 3) не дается информация о запасе устойчивости.

Последние исследования [5] показывают, что кроме относительных равновесий имеются также другие устойчивые квазипериодические траектории.

Предложенная нами методика использует комбинацию аналитического подхода и численного эксперимента, основанного на методе Монте-Карло, модели линейной регрессии и позволяет нам исследовать стационарность любых траекторий. Такой подход дает дополнительную информацию о характере устойчивых орбит, например, о запасе устойчивости, об изменении периода орбит.

1. Григор'єва Л. В., Козоріз В. В., Козоріз О. В., Ляшко С. І. Про динамічну задачу двох вільних циліндричних магнітів та її Maple-модельовання // Доп. НАН України. – 2007. – № 11. – С. 41–47.
2. Zub S. Mathematical model of magnetically interacting rigid bodies // PoS(ACAT08)116. – 2009. – 5 p.
3. Zub С. С. Гамильтонов формализм для магнитного взаимодействия свободных тел // Журн. вычисл. и прикл. математики. – 2010. – Вып. 3(102). – С. 49–62.
4. Zub С. С. Дослідження стійкості орбітального руху в системі двох магнітно взаємодіючих тіл // Вісн. Київ. нац. ун-ту. ім. Тараса Шевченка. – 2011. – Вип. 2. – С. 176–184.
5. Zub С. С., Ляшко С. И., Ляшко С. В. Исследование устойчивости орбитального движения магнитно взаимодействующих тел методом численного эксперимента // Журн. вычисл. и прикл. математики. – 2012. – Вып. 1(108). – С. 39–54.
6. Самойленко Ю. И. Проблемы и методы физической кибернетики. – Киев: Изд. Ин-та математики НАН Украины, 2006. – 644 с.
7. Козорез В. В. Динамические системы магнитно взаимодействующих свободных тел. – Киев: Наук. думка, 1981. – 140 с.

8. *Marsden J. E.* Lectures on mechanics. – London: Cambridge Univ. Press, 1992. – 254 p.
9. *Borisov A. V., Mamaev I. S.* Poisson structure and Lie algebras in Hamiltonian mechanics. – Izhevsk: Udmurt Univ., 1999. – 470 p.
10. *Zub S. S.* Contact-free static stable equilibrium in the ground and space systems // Proceedings of "Int. Conference on Magnetically Levitated Systems and Linear Drivers (MAGLEV'2002)". – September 3–5, 2002. – Lausanne, Switzerland. – 2002. – PP02105.
11. *Шильников Л. П., Шильников А. Л., Тураев Д. В., Чуа Л.* Методы качественной теории в нелинейной динамике: Пер. с англ. – Москва; Ижевск: Изд. Ин-та комп. исследований, 2003. – 221 с.
12. *Skokos Ch.* Alignment indices: a new, simple method for determining the ordered or chaotic nature of orbits // J. Phys. A: Math. and Theor. – 2001. – **34**. – P. 129–143.
13. *Ortega J-P., Ratiu T. S.* Non-linear stability of singular relative periodic orbits in Hamiltonian systems with symmetry // J. Geom. Phys. – 1999. – **32**. – P. 160–188.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Поступило в редакцію 12.03.2012

С. С. Зуб, член-кореспондент НАН України **С. І. Ляшко**, **В. С. Ляшко**

Про стійкість орбітального руху двох магнітних тіл

Проведено порівняльний аналіз сучасних методів дослідження динаміки магнітно взаємодіючих тіл та наведено нові результати з дослідження динаміки в моделі магнітних гантелей. Розглядаються різні аспекти застосування нових теоретико-групових методів щодо дослідження стійкості орбітального руху двох магнітних тіл. Обговорюється запропонована авторами методика дослідження стійкості магнітних систем, що включає: чисельне моделювання гамільтонових рівнянь руху, метод Монте-Карло заповнення фазового об'єму, процедури статистичної обробки даних, отриманих в результаті чисельного експерименту.

S. S. Zub, Corresponding Member of the NAS of Ukraine **S. I. Lyashko**,
V. S. Lyashko

About the orbital motion stability of two magnetic bodies

The comparative analysis of modern research methods for the dynamics of magnetically interacting bodies is executed. The new results of studies of the interaction of magnetic dumbbells are presented. The various aspects of the application of the group-theoretic methods to the research of the stability of the orbital motion of two magnetic bodies are considered. The procedure of magnetic systems offered by the authors includes the numerical modeling of the Hamilton motion equations, Monte Carlo method for the filling of the phase-space volume, and the processing of statistical data obtained in computational experiments.

Анализ задачи распознавания автомата над кольцом

(Представлено академиком НАН Украины А. А. Лещевским)

Разработан метод приближенного решения задачи идентификации семейств автоматов, представленных системами уравнений с параметрами над конечным ассоциативно-коммутативным кольцом с единицей. Предложенный метод основан на построении имитационной модели для исследуемого семейства автоматов. Выделены имитационные модели, моделирующие поведение автоматов исследуемого семейства автоматов с заданной точностью в "наихудшем случае" и "в среднем".

1. Актуальность задачи распознавания автоматных моделей обусловлена их многочисленными применениями при решении задач преобразования информации. Высокая сложность этой задачи стимулировала исследования приближенных методов ее решения, анализ которых содержится в [1]. Многочисленные попытки применения автоматно-алгебраических моделей при анализе современных шифров [2] выделяют в качестве новой актуальной задачи распознавание конечного автомата, представленного системой уравнений с параметрами над конечным ассоциативно-коммутативным кольцом $\mathcal{K} = (K, +, \cdot)$ с единицей. Анализ этой задачи дает возможность установить глубокие внутренние связи между современной алгеброй, теорией систем, теорией автоматов и криптологией.

2. Зафиксируем числа $l, n_1, n_2, n_3 \in \mathbb{N}$, множество $\mathbf{A} \subseteq K^l$ ($|\mathbf{A}| \geq 1$) и отображения $\mathbf{f}_1: K^{n_1+n_2+l} \rightarrow K^{n_1}$ и $\mathbf{f}_2: K^{n_1+n_2+l} \rightarrow K^{n_3}$. Система уравнений

$$\begin{cases} \mathbf{q}_{t+1} = \mathbf{f}_1(\mathbf{q}_t, \mathbf{x}_{t+1}, \mathbf{a}), \\ \mathbf{y}_{t+1} = \mathbf{f}_2(\mathbf{q}_t, \mathbf{x}_{t+1}, \mathbf{a}) \end{cases} \quad (t \in \mathbb{Z}_+) \quad (1)$$

определяет над кольцом \mathcal{K} такое семейство конечных автоматов $\mathcal{M} = \{M_{\mathbf{a}}\}_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}}$, что для каждого значения параметров $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ элементы $\mathbf{q}_t \in K^{n_1}$, $\mathbf{x}_t \in K^{n_2}$ и $\mathbf{y}_t \in K^{n_3}$ являются, соответственно, состоянием, входным символом и выходным символом автомата $M_{\mathbf{a}}$ в момент t .

Обозначим через $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ ($\mathbf{a} \in \mathbf{A}$, $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$) отображение множества входных слов $(K^{n_2})^+$ в множество выходных слов $(K^{n_3})^+$, реализуемое инициальным автоматом $(M_{\mathbf{a}}, \mathbf{q}_0)$. Ясно, что каждому автомату $M_{\mathbf{a}}$ ($\mathbf{a} \in \mathbf{A}$) может быть поставлено в соответствие семейство автоматных отображений $\mathcal{F}_{\mathbf{a}} = \{F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}\}_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}}$.

Расстоянием (по Хеммингу) между словами $v = u_1^{(1)} \dots u_m^{(1)}$ и $w = u_1^{(2)} \dots u_m^{(2)}$ в алфавите U , где $u_j^{(i)} \in U$ ($i = 1, 2; j = 1, \dots, m$), назовем количество $\varrho(v, w)$ таких позиций i ($1 \leq i \leq m$), что $u_i^{(1)} \neq u_i^{(2)}$.

Рассмотрим следующую задачу распознавания автомата над кольцом \mathcal{K} .

Дан автомат M , о котором известно только то, что $M \in \mathcal{M}$. Требуется на основе (возможно, кратного) эксперимента с автоматом M построить его следствие, т. е. автоматно-алгебраическую модель, которая с заданной точностью моделирует поведение автомата M на множестве входных слов $(K^{n_2})^+$.

Таким образом, предметом настоящего исследования является построение имитационной модели для семейства автоматов (1), т.е. алгоритма, основанного на использовании некоторого семейства автоматов над кольцом \mathcal{K} , более простого, чем семейство \mathcal{M} , осуществляющего моделирование поведения любого автомата $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ с заданной точностью.

3. Построим имитационную модель семейства автоматов \mathcal{M} следующим образом.

Зафиксируем числа $r, l_1 \in \mathbb{N}$, непустое множество $\mathbf{B} \subseteq K^{l_1}$ ($|\mathbf{B}| \leq |\mathbf{A}|$) и три семейства отображений

$$\begin{aligned} & \{\varphi_{\mathbf{b}}^{(1)} : K^{n_1} \times K^{n_2} \rightarrow K^{n_3}\}_{\mathbf{b} \in \mathbf{B}}, \\ & \left\{ \varphi_{\mathbf{b}}^{(2)} : K^{n_1} \times \left(\bigcup_{j=1}^{r-1} K^{n_3} \right)^j \times K^{n_2} \rightarrow K^{n_3} \right\}_{\mathbf{b} \in \mathbf{B}}, \\ & \{\varphi_{\mathbf{b}}^{(3)} : K^{n_1} \times (K^{n_3})^r \times K^{n_2} \rightarrow K^{n_3}\}_{\mathbf{b} \in \mathbf{B}}. \end{aligned}$$

Рассмотрим семейство таких отображений

$$\mathcal{G}_{\mathbf{B}} = \{G_{\mathbf{b}} : K^{n_1} \times (K^{n_2})^+ \rightarrow (K^{n_3})^+\}_{\mathbf{b} \in \mathbf{B}},$$

что $G_{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m) = \mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_m$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}, m \in \mathbb{N}$), где

$$\mathbf{y}_i = \begin{cases} \varphi_{\mathbf{b}}^{(1)}(\mathbf{q}_0, \mathbf{x}_1), & \text{если } i = 1, \\ \varphi_{\mathbf{b}}^{(2)}(\mathbf{q}_0, \mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_{i-1}, \mathbf{x}_i), & \text{если } i = 2, \dots, r, \\ \varphi_{\mathbf{b}}^{(3)}(\mathbf{q}_0, \mathbf{y}_{i-r} \dots \mathbf{y}_{i-1}, \mathbf{x}_i), & \text{если } r < i \leq m, \end{cases} \quad (2)$$

для любых $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$ и $\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m \in (K^{n_2})^+$.

Определим отображения $H_{\mathbf{b}, \mathbf{q}_0} : (K^{n_2})^+ \rightarrow (K^{n_3})^+$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$) следующим образом: $H_{\mathbf{b}, \mathbf{q}_0}(\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m) = G_{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, \mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m)$ для любых $\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m \in (K^{n_2})^+$ ($m \in \mathbb{N}$).

Из (2) вытекает, что $H_{\mathbf{b}, \mathbf{q}_0}$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$) — автоматные отображения, причем каждое семейство автоматных отображений $\mathcal{H}_{\mathbf{b}} = \{H_{\mathbf{b}, \mathbf{q}_0}\}_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}}$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}$) определяет конечный автомат над кольцом \mathcal{K} .

Зафиксировав сюръекцию $h : \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{B}$, мы можем каждому автомату $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ поставить в соответствие автомат, определяемый семейством автоматных отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$.

Таким образом, упорядоченная пара $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ может быть выбрана в качестве имитационной модели семейства автоматов \mathcal{M} , если выполнены следующие три условия:

1) построение семейства отображений $\mathcal{G}_{\mathbf{B}}$ и сюръекции h осуществляется только на основе анализа системы уравнений (1) без дополнительных ограничений на значения параметра $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$;

2) для каждого фиксированного значения параметра $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ сложность вычислений в соответствии с семейством отображений $\mathcal{F}_{\mathbf{a}}$ не меньше, чем сложность вычислений в соответствии с семейством отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$;

3) для каждого фиксированного значения параметра $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ автомат, определяемый семейством автоматных отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$, моделирует поведение автомата $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ с заданной точностью.

Ясно, что те или иные ограничения на структуру отображений $\varphi_{\mathbf{b}}^{(1)}, \varphi_{\mathbf{b}}^{(2)}, \varphi_{\mathbf{b}}^{(3)}$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}$) накладывают соответствующие ограничения на каждое семейство автоматных отображений $\mathcal{H}_{\mathbf{b}}$ и, следовательно, на структуру автомата, определяемого этим семейством.

Естественно потребовать, чтобы для имитационной модели $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ отображения $\varphi_{h(\mathbf{a})}^{(1)}$ и $\varphi_{h(\mathbf{a})}^{(2)}$ были выбраны так, чтобы истинными были равенства

$$H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0} \Big|_{\bigcup_{i=1}^r K^{n_2}} = F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} \Big|_{\bigcup_{i=1}^r K^{n_2}} \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}). \quad (3)$$

Содержательный смысл равенств (3) состоит в следующем: имитационная модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$, подсоединенная к входу и выходу исследуемого автомата $M_{\mathbf{a}}$ ($\mathbf{a} \in \mathbf{A}$), пропускает первые r выходных символов, после чего блокирует выход автомата $M_{\mathbf{a}}$ и начинает моделировать его поведение на оставшейся части входного слова. Всюду в дальнейшем считаем, что это условие выполнено.

Среди ограничений на структуру отображений $\varphi_{\mathbf{b}}^{(3)}$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}$) с прикладной точки зрения представляет интерес следующее ограничение: для каждого отображения $\varphi_{\mathbf{b}}^{(3)}$ ($\mathbf{b} \in \mathbf{B}$) переменная \mathbf{q}_0 является фиктивной. Это ограничение означает, что имитационная модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ осуществляет моделирование поведения каждого автомата $M_{\mathbf{a}}$ ($\mathbf{a} \in \mathbf{A}$) посредством использования автоматов с конечной памятью.

4. Определим точность имитационной модели $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$, используя стандартный подход прикладной теории алгоритмов [3, 4].

Пусть $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}(\mathbf{x} \dots \mathbf{x}_m) = \mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_m$ и $H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0}(\mathbf{x} \dots \mathbf{x}_m) = \tilde{\mathbf{y}}_1 \dots \tilde{\mathbf{y}}_m$, где $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$, $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ и $\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m \in (K^{n_2})^m$ ($m \in \mathbb{N}$).

Число

$$\alpha_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} = \sum_{\mathbf{x}_1 \dots \mathbf{x}_m \in (K^{n_2})^m} (m - \rho(\mathbf{y}_1 \dots \mathbf{y}_m, \tilde{\mathbf{y}}_1 \dots \tilde{\mathbf{y}}_m)) \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}, m \in \mathbb{N})$$

является средним количеством позиций в выходных словах, в которых отображения $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ и $H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0}$ совпадают на множестве входных слов длины m . Отсюда вытекает, что число

$$\beta_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} = m^{-1} \alpha_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}, m \in \mathbb{N})$$

является средним количеством позиций в выходных словах, приходящимся на одну букву входного слова, в которых отображения $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ и $H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0}$ совпадают на множестве входных слов длины m . Следовательно, число

$$\gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} = \frac{|K^{n_2}| - 1}{|K^{n_2}|^{m+1} - |K^{n_2}|} \sum_{i=1}^m |K^{n_2}|^i \beta_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1}, m \in \mathbb{N})$$

является средним количеством позиций в выходных словах, приходящимся на одну букву входного слова, в которых отображения $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ и $H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0}$ совпадают на множестве всех входных слов длины, не превосходящей число m .

Числа

$$\underline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \underline{\lim} \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \inf \{ \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, i} \mid i \in \mathbb{N}_m \} \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1})$$

и

$$\overline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \overline{\lim} \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, m} = \lim_{m \rightarrow \infty} \sup \{ \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0, i} \mid i \in \mathbb{N}_m \} \quad (\mathbf{a} \in \mathbf{A}, \mathbf{q}_0 \in K^{n_1})$$

определяют, соответственно, нижнюю и верхнюю границу для среднего количества позиций в выходных словах, приходящегося на одну букву входного слова, в которых отображения $F_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ и $H_{h(\mathbf{a}), \mathbf{q}_0}$ совпадают на своей области определения $(K^{n_2})^+$.

Следовательно, для каждого $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$:

1) числа $\underline{\eta}_{\mathbf{a}} = \min_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}} \underline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ и $\bar{\eta}_{\mathbf{a}} = \max_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}} \bar{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ определяют, соответственно, нижнюю и верхнюю границу для среднего количества позиций в выходных словах, приходящегося на одну букву входного слова, в которых отображения, принадлежащие семейству отображений $\mathcal{F}_{\mathbf{a}}$, реализуемых автоматом $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$, совпадают с соответствующими отображениями, принадлежащими семейству отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$;

2) если $\underline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \bar{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ для всех $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$, то:

а) число $\eta_{\mathbf{a}} = \min_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}} \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ определяет в наихудшем случае среднее количество позиций в выходных словах, приходящееся на одну букву входного слова, в которых отображения, принадлежащие семейству отображений $\mathcal{F}_{\mathbf{a}}$, реализуемых автоматом $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$, совпадают с соответствующими отображениями, принадлежащими семейству отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$;

б) число $\zeta_{\mathbf{a}} = |K^{n_1}|^{-1} \sum_{\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}} \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ определяет в среднем количество позиций в выходных словах, приходящееся на одну букву входного слова, в которых отображения, принадлежащие семейству отображений $\mathcal{F}_{\mathbf{a}}$, реализуемых автоматом $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$, совпадают с соответствующими отображениями, принадлежащими семейству отображений $\mathcal{H}_{h(\mathbf{a})}$.

Таким образом,

1) числа $\underline{\eta} = \min_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \underline{\eta}_{\mathbf{a}}$ и $\bar{\eta} = \max_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \bar{\eta}_{\mathbf{a}}$ определяют, соответственно, нижнюю и верхнюю границу для среднего количества позиций в выходных словах, приходящегося на одну букву входного слова, в которых автоматные отображения, реализуемые семейством автоматов \mathcal{M} , совпадают с автоматными отображениями, реализуемыми имитационной моделью $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$;

2) если $\underline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \bar{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \gamma_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ для всех $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$ и $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$, то

а) число $\nu_1 = \min_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \eta_{\mathbf{a}}$ определяет в наихудшем случае среднее количество позиций в выходных словах, приходящееся на одну букву входного слова, в которых автоматные отображения, реализуемые семейством автоматов \mathcal{M} , совпадают с автоматными отображениями, реализуемыми имитационной моделью $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$;

б) число $\nu_2 = |\mathbf{A}|^{-1} \sum_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \eta_{\mathbf{a}}$ определяет среднее для наихудших случаев от средних количеств позиций в выходных словах, приходящихся на одну букву входного слова, в которых автоматные отображения, реализуемые семейством автоматов \mathcal{M} , совпадают с автоматными отображениями, реализуемыми имитационной моделью $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$;

в) число $\nu_3 = \min_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \zeta_{\mathbf{a}}$ определяет наихудший случай для средних от средних количеств позиций в выходных словах, приходящееся на одну букву входного слова, в которых автоматные отображения, реализуемые семейством автоматов \mathcal{M} , совпадают с автоматными отображениями, реализуемыми имитационной моделью $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$;

г) число $\nu_4 = |\mathbf{A}|^{-1} \sum_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}} \zeta_{\mathbf{a}}$ определяет среднее от средних количеств позиций в выходных словах, приходящееся на одну букву входного слова, в которых автоматные отображения, реализуемые семейством автоматов \mathcal{M} , совпадают с автоматными отображениями, реализуемыми имитационной моделью $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$.

Рассмотренные случаи охватывают все представляющие интерес комбинации понятий “в наихудшем случае” и “в среднем” и дают возможность охарактеризовать имитационную модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ как $[\underline{\eta}, \bar{\eta}]$ -точную или, в случае, когда $\underline{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0} = \bar{\gamma}_{\mathbf{a}, \mathbf{q}_0}$ для всех $\mathbf{q}_0 \in K^{n_1}$ и $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$, как ν -точную, где ν — любое из чисел ν_1, ν_2, ν_3 или ν_4 . Естественно определить имитационную модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ как асимптотически точную, если $\nu = 1$.

5. Проиллюстрируем построение имитационной модели $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ на примере семейства автоматов \mathcal{M} с лагом 2, определенного над кольцом \mathcal{K} системой уравнений

$$\begin{cases} q_{t+2} = a_1 + a_2 q_{t+1}^2 + a_3 q_t + a_4 x_{t+1}, \\ y_{t+1} = a_5 q_{t+2}, \end{cases} \quad (t \in \mathbb{Z}_+), \quad (4)$$

где множество параметров имеет вид

$$\mathbf{A} = \{(a_1, a_2, a_3, a_4, a_5) \mid a_1, a_2, a_3 \in K \setminus \{0\}; a_4, a_5 \in K^{inv}\}.$$

При каждом фиксированном $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ для автомата $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ вектор $\mathbf{q}_t = (q_{t+1}, q_t)$ — состояние в момент t , а x_{t+1} и y_{t+1} — соответственно, входной и выходной символы в момент $t + 1$. Таким образом, для рассматриваемого примера $l = 5$, $n_1 = 2$, а $n_2 = n_3 = 1$.

Отметим, что уравнение

$$q_{t+2} = a_1 + a_2 q_{t+1}^2 + a_3 q_t + a_4$$

определяет над кольцом \mathcal{K} аналоги ряда модельных хаотических динамических систем [5], в том числе отображения Эно.

Подставив значение q_{t+2} , определенное 1-м уравнением системы (4), во 2-е уравнение этой системы, получим

$$y_{t+1} = a_1 a_5 + a_2 a_5 q_{t+1}^2 + a_3 a_5 q_t + a_4 a_5 x_{t+1}. \quad (5)$$

Подставив $t = 0, 1, \dots$ в (5), учитывая 2-е уравнение системы (4) и то обстоятельство, что $a_4 \in K^{inv}$, получим, что для каждого автомата $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ система уравнений (4) эквивалентна системе уравнений

$$\begin{cases} y_1 = a_1 a_5 + a_2 a_5 q_1^2 + a_3 a_5 q_0 + a_4 a_5 x_1, \\ y_2 = a_1 a_5 + a_2 a_5^{-1} y_1^2 + a_3 a_5 q_1 + a_4 a_5 x_2, \\ y_{t+1} = a_1 a_5 + a_2 a_5^{-1} y_{t+1}^2 + a_3 y_t + a_4 a_5 x_{t+1}, \end{cases} \quad (t \geq 2), \quad (6)$$

Из (6) вытекает, что для семейства автоматов \mathcal{M} , представленного над кольцом \mathcal{K} системой уравнений (4), система уравнений

$$\begin{cases} y_1 = b_1 + b_2 q_1^2 + b_3 q_0 + b_4 x_1, \\ y_2 = b_1 + b_5 y_1^2 + b_3 q_1 + b_4 x_2, \\ y_{t+1} = b_1 + b_5 y_{t+1}^2 + b_6 y_t + b_4 x_{t+1}, \end{cases} \quad (t \geq 2), \quad (7)$$

где

$$b_1 = a_1 a_5, \quad b_2 = a_2 a_5, \quad b_3 = a_3 a_5, \quad b_4 = a_4 a_5, \quad b_5 = a_2 a_5^{-1}, \quad b_6 = a_3, \quad (8)$$

определяет для каждого $\nu \in \{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4\}$ асимптотически точную имитационную модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ ($\mathbf{B} \subset K^6$). Таким образом, $l_1 = 6$, $r = 2$, а отображение $h: \mathbf{A} \rightarrow \mathbf{B}$, определенное равенствами (8), является биекцией (т. е. условие $|\mathbf{B}| \leq |\mathbf{A}|$ выполнено).

Для каждого $\mathbf{a} \in \mathbf{A}$ значение $h(\mathbf{a}) = (b_1, \dots, b_6)$ вычисляется следующим образом. Осуществляется поиск входного слова $x_1 \dots x_m \in K^m$ ($m \geq 6$) заранее неизвестной длины, которое дает возможность сформировать в результате эксперимента с автоматом $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ систему линейных уравнений

$$\begin{cases} b_1 + b_2 q_1^2 + b_3 q_0 + b_4 x_1 = y_1, \\ b_1 + b_5 y_1^2 + b_3 q_1 + b_4 x_2 = y_2, \\ b_1 + b_5 y_2^2 + b_6 y_1 + b_4 x_3 = y_3, \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ b_1 + b_5 y_{m-1}^2 + b_6 y_{m-2} + b_4 x_m = y_m \end{cases}$$

относительно неизвестных b_1, \dots, b_6 , ранг матрицы которой равен 6. Решив эту систему, найдем значения b_1, \dots, b_6 .

Так как $a_4 \in K^{inv}$, то из (4) вытекает, что \mathcal{M} — семейство обратимых автоматов, причем для каждого автомата $M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$ обратный автомат $M_{\mathbf{a}}^{-1}$ имеет следующий вид:

$$\begin{cases} q_{t+2} = a_5^{-1} y_{t+1}, \\ x_{t+1} = -a_1 a_4^{-1} - a_2 a_4^{-1} q_{t+1}^2 - a_3 a_4^{-1} q_t + a_4^{-1} a_5^{-1} y_{t+1} \end{cases} \quad (t \in \mathbb{Z}_+).$$

Из (7) вытекает, что для семейства автоматов $\mathcal{M}^{-1} = \{M_{\mathbf{a}}^{-1}\}_{\mathbf{a} \in \mathbf{A}}$ асимптотически точная для каждого $\nu \in \{\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4\}$ имитационная модель $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}^{-1}, h)$ ($\mathbf{B} \subset K^6$) имеет вид

$$\begin{cases} x_1 = -b_4^{-1} b_1 - b_4^{-1} b_2 q_1^2 - b_4^{-1} b_3 q_0 + b_4^{-1} y_1, \\ x_2 = -b_4^{-1} b_1 - b_4^{-1} b_5 y_1^2 - b_4^{-1} b_3 q_1 + b_4^{-1} y_2, \\ x_{t+1} = b_4^{-1} b_1 - b_4^{-1} b_5 y_{t+1}^2 - b_4^{-1} b_6 y_t + b_4^{-1} y_{t+1} \end{cases} \quad (t \geq 2). \quad (9)$$

Отметим, что если упорядоченная пара $(M_{\mathbf{a}}, M_{\mathbf{a}}^{-1})$ ($M_{\mathbf{a}} \in \mathcal{M}$) используется в качестве математической модели симметричного поточного шифра (в этом случае параметры a_1, \dots, a_5 играют роль долговременного секретного ключа, а начальное состояние \mathbf{q}_0 — роль секретного сеансового ключа), то имитационные модели $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}, h)$ и $(\mathcal{G}_{\mathbf{B}}^{-1}, h)$ предоставляют криптоаналитику большие возможности для вмешательства как в процесс шифрования информации, так и в процесс расшифрования.

6. Таким образом, разработан подход к приближенному решению задачи идентификации семейств автоматов, представленных системами уравнений с параметрами над кольцом \mathcal{K} . Выделение над кольцом \mathcal{K} нетривиальных классов семейств автоматов, для которых построение любой достаточно точной имитационной модели — трудная задача, а также нетривиальных классов семейств автоматов, для которых построение некоторой достаточно точной имитационной модели — легкая задача, представляет собой одно из направлений исследований. Другое направление исследований связано с выделением над кольцом \mathcal{K} нетривиальных классов семейств автоматов, для которых существуют такие $[\underline{\eta}, \bar{\eta}]$ -точные имитационные модели, для которых $|\bar{\eta} - \underline{\eta}| < \varepsilon$, где ε — заданное положительное число.

1. Бабаи А. В. Приближенные модели конечных автоматов // Обозрение прикл. и промышл. математики. – 2005. – **12**, вып. 2. – С. 108–117.
2. Харин Ю. С., Берник В. И., Матвеев Г. В. и др. Математические и компьютерные основы криптологии. – Минск: Новое знание, 2003. – 382 с.
3. Ахо А., Хопкрофт Дж., Ульман Дж. Построение и анализ вычислительных алгоритмов. – Москва: Мир, 1979. – 536 с.
4. Рейнгольд Э., Нивергельт Ю., Део Н. Комбинаторные алгоритмы: теория и практика. – Москва: Мир, 1980. – 476 с.
5. Кузнецов С. П. Динамический хаос. – Москва: Физматлит, 2001. – 296 с.

*Институт прикладной математики
и механики НАН Украины, Донецк*

Поступило в редакцию 22.12.2011

В. В. Скобелєв

Аналіз задачі розпізнавання автомата над кільцем

Розроблено метод наближеного розв'язання задачі ідентифікації сімей автоматів, наведених системами рівнянь з параметрами над скінченним асоціативно-комутативним кільцем з одиницею. Запропонований метод базується на побудові імітаційної моделі для досліджуваної сім'ї автоматів. Виділено імітаційні моделі, які моделюють поведінку сім'ї автоматів з заданою точністю у “найгіршому випадку” та “у середньому”.

V. V. Skobelev

Analysis of the problem of recognition of an automaton over some ring

A method of approximate solution of the problem of identification for families of automata presented by systems of equations with parameters over a finite associative-commutative ring with unity is proposed. The method is based on the construction of a simulation model for the family of automata under study. The models simulating the behavior of such family with given exactness “in the worst case” and “on the average” are separated.

В. А. Стоян, К. В. Двірничук

До побудови інтегрального еквіваленту лінійних диференціальних моделей

(Представлено академіком НАН України В. С. Дейнекою)

Розглядаються лінійні динамічні системи, просторово-зосереджені або розподілені в одно-, дво- та багатовимірному просторі. Пропонується алгоритм переходу від визначеної рівнянням та системою рівнянь диференціальної форми математичної моделі до її інтегрального еквіваленту.

Методи псевдоінверсної алгебри, започатковані в [1, 2] та розвинені в [3, 4], у поєднанні з ідеями [5, 6] математичного моделювання впливу початково-крайових зовнішньо-динамічних збурюючих факторів на стан розподілених просторово-часових систем дозволили побудувати [7, 8] просту і надійну методику розв'язання прямих та обернених задач дослідження динаміки таких систем за умов неповноти та некоректності інформації про їх початково-крайовий стан. Суттєвим в запропонованій методиці є наявність передаточної функції від розподілених просторово-часових збурень до стану системи, який цим збуренням відповідає. Питання побудови таких передаточних функцій вивчалися нами у роботах [9, 10], де ці функції будувалися для лінійних динамічних систем, описаних лінійними диференціальними рівняннями [9], або системою таких рівнянь [10]. Дієздатність отриманих при цьому наукових результатів була проілюстрована [10, 11] на одновимірних динамічних системах. Розв'язання проблем практичної реалізації методик [9, 10] для лінійних динамічних систем більшої вимірності і розглядаються нижче.

1. Розглянемо просторово розподілену динамічну систему, функція $y = (x, t)$ (тут $x = (x_1, \dots, x_n)$ — просторова координата; t — час, а $\partial_x = (\partial_{x_1}, \dots, \partial_{x_n})$ та ∂_t — похідні за цими координатами і часом) якої задовольняє рівняння

$$L(\partial_x, \partial_t)y(x, t) = u(x, t), \quad (1)$$

в якому $L(\partial_x, \partial_t)$ — лінійний диференціальний оператор, а $u(x, t)$ — просторово розподілене зовнішньо-динамічне збурення, що супроводжує динаміку розглядуваної системи. Рівняння (1) є частинним випадком диференціальної моделі вигляду

$$A(\partial_x, \partial_t)\vec{y}(x, t) = \vec{u}(x, t), \quad (2)$$

яка при визначеному матричному диференціальному операторі

$$A(\partial_x, \partial_t) = [a_{ij}(\partial_x, \partial_t)]_{i,j=1}^{i=M, j=L}$$

(тут $a_{ij}(\partial_x, \partial_t)$, як і вище, — лінійні диференціальні оператори) та при визначеній вектор-функції

$$\vec{u}(x, t) = \text{col}(u_m(x, t), m = \overline{1, M})$$

описує вектор-функцію

$$\vec{y}(x, t) = \text{col}(y_l(x, t), l = \overline{1, L})$$

стану системи.

Еквівалентним, більш зручним [7, 8] для практичного використання, поданням лінійних диференціальних моделей (1), (2) є інтегральне подання [9, 10]:

$$y(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (G(x - x', t - t')u(x', t')) dx' dt', \quad (3)$$

$$\vec{y}(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\vec{G}(x - x', t - t')\vec{u}(x', t')) dx' dt', \quad (4)$$

в якому

$$G(x - x', t - t') = \frac{1}{(2\pi i)^{n+1}} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \left(\frac{e^{p(x-x') + q(t-t')}}{L(p, q)} \right) dpdq, \quad (5)$$

$$\vec{G}(x - x', t - t') = \frac{1}{(2\pi i)^{n+1}} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \int_{-i\infty}^{+i\infty} (A^{-1}(p, q)E(p, q, x - x', t - t')) dpdq \quad (6)$$

за умови, що i — уявна одиниця; $p = (p_1, \dots, p_n)$, $dp = dp_1 \dots dp_n$, $p(x - x') = p_1(x_1 - x'_1) + \dots + p_n(x_n - x'_n)$, $E(p, q, x - x', t - t') = \text{diag}(e^{p(x-x') + q(t-t')}, m = \overline{1, M})$.

Для просторово зосереджених динамічних систем, коли $n = 0$, визначення (5), (6) функції $G(t - t')$ та матричної функції $\vec{G}(t - t')$ заміняться такими:

$$G(t - t') = \sum_{k=1}^K \text{Res}[L^{-1}(q)e^{q(t-t')}, q_k], \quad (7)$$

$$\vec{G}(t - t') = \sum_{k=1}^K \text{Res}[A^{-1}(q)e^{q(t-t')}, q_k]. \quad (8)$$

Тут $\text{Res}[f(q), q_k]$ — інтегральний лишок функції $f(q)$ в точці q_k , де q_k — k -й корінь рівняння

$$L(q) = 0 \quad (9)$$

для (7) та рівняння

$$\det A(q) = 0 \quad (10)$$

для (8), а K — кількість таких коренів.

Враховуючи, що у нашому випадку

$$f(q) = \frac{\varphi(q)}{\psi(q)}, \quad (11)$$

де

$$\varphi(q) = e^{q(t-t')}, \quad \psi(q) = L(q)$$

для (7), та

$$\varphi(q) = e^{q(t-t')} [A_{ij}]_{j,i=1}^{j=L,i=M}, \quad \psi(q) = \det A(q)$$

(тут $A_{ji}(q)$ — алгебраїчне доповнення елемента $a_{ij}(q)$ матриці $A(q)$) для (8), маємо

$$\text{Res}[f(q), q_k] = \frac{\varphi(q_k)}{\psi'(q_k)}, \quad (12)$$

якщо q_k — простий корінь, або

$$\text{Res}[f(q), q_k] = \frac{1}{(N_k - 1)!} \lim_{q \rightarrow q_k} \left(\frac{d^{N_k-1}}{dq^{N_k-1}} ((q - q_k)^{N_k} f(q)) \right), \quad (13)$$

якщо q_k — N_k -кратний корінь (9), (10).

2. Співвідношення (7), (8) для побудови передаточної функції $G(t - t')$ системи (1) та передаточної матричної функції $\overline{G}(t - t')$ системи (2) ($n = 0$) мають місце, коли q_k ($k = \overline{1, K}$) — ізольовані корені рівняння (9) та (10) відповідно. Останнє не створює ніяких проблем для випадку, коли $n = 0$, оскільки q_k ($k = \overline{1, K}$) тут є коренями поліномів $L(q)$ та $\det A(q)$ відповідно. Проблеми можуть виникнути (і вони виникають), коли $n \geq 1$, а корені рівнянь

$$L(p, q) = 0 \quad (14)$$

та (тут та далі $p = (p_1, \dots, p_n)$)

$$\det A(p, q) = 0 \quad (15)$$

розміщені на кривій, поверхні та гіперповерхні у просторі змінних p_1, \dots, p_n, q .

Для початку обмежемося випадком, коли $n = 1$, а розв'язки рівнянь (14), (15) визначаються кривою

$$l(p, q) = 0,$$

або (що еквівалентно)

$$q = q_k(p) \quad (1 \geq k \geq K), \quad (16)$$

у просторі змінних p, q .

При реалізації співвідношень (12), (13) та (7), (8) будемо виходити з того, що визначена згідно з (11) для $n = 0$ функція $f(q)$ тепер матиме вигляд

$$f(p, q) = \frac{\varphi(p, q)}{\psi(p, q)} \quad \text{при} \quad \varphi(p, q) = e^{p(x-x') + q(t-t')}, \quad \psi(p, q) = L(p, q) \quad (17)$$

для $G(x - x', t - t')$ та

$$\varphi(p, q) = e^{p(x-x') + q(t-t')} [A_{ji}(p, q)]_{j,i=1}^{j=L,i=M}, \quad \psi(p, q) = \det A(p, q) \quad (18)$$

для $\overline{G}(x - x', t - t')$ відповідно.

З урахуванням (16) аналогічно (12), (13) для інтегрального лишку функції $f(p, q)$, вирахованого у точці $(p_{k_1}^{(k)}, q_k(p_{k_1}^{(k)}))$ ($k = \overline{1, K}$), маємо:

$$\text{Res}(f(p, q), p_{k_1}^{(k)}, q_k(p_{k_1}^{(k)})) = \text{Res} \left[\frac{\varphi_{1k}(p)}{\psi_{1k}(p)}, p_{k_1}^{(k)} \right], \quad (19)$$

де

$$\frac{\varphi_{1k}(p)}{\psi_{1k}(p)} = \text{Res} \left[\frac{\varphi(p, q)}{\psi(p, q)}, q = q_k(p) \right], \quad (20)$$

а $p_{k_1}^{(k)}$ ($k_1 = \overline{1, K}, k = \overline{1, K}$) — корені рівняння $\psi_{1k}(p) = 0$.

А це означає, що співвідношення (7), (8) у цьому випадку запишуться у вигляді

$$\left. \begin{aligned} G(x - x', t - t') \\ \overline{G}(x - x', t - t') \end{aligned} \right\} = \sum_{k=1}^K \sum_{k_1=1}^{K_k} \text{Res}[f(p, q), p_{k_1}^{(k)}, q_k(p_{k_1}^{(k)})] = \sum_{k=1}^K \sum_{k_1=1}^{K_k} \text{Res} \left[\frac{\varphi_{1k}(p)}{\psi_{1k}(p)}, p_{k_1}^{(k)} \right], \quad (21)$$

де $\varphi_{1k}(p)$, $\psi_{1k}(p)$ ($k = \overline{1, K}$) — функції, згідно з (20) визначені через введені в (17), (18) функції $\varphi(p, q)$, $\psi(p, q)$, а розуміння $\text{Res} [\dots]$ дано в (12), (13).

3. Розглянемо поширення отриманих вище результатів з побудови передаточної функції (5) та матриці (6) для випадку, коли $n = 2$.

Будемо виходити з того, що, аналогіно (7), (8) та (19), функція $G(x - x', t - t')$ та матриця $\overline{G}(x - x', t - t')$, в яких $x = (x_1, x_2)$, визначатимуться інтегральними лишками функції

$$f(p_1, p_2, q) = \frac{\varphi(p_1, p_2, q)}{\psi(p_1, p_2, q)}$$

при

$$\varphi(p_1, p_2, q) = e^{p(x-x') + q(t-t')}, \quad \psi(p_1, p_2, q) = L(p_1, p_2, q) \quad (22)$$

для $G(x - x', t - t')$ та

$$\varphi(p_1, p_2, q) = e^{p(x-x') + q(t-t')} [A_{ji}]_{j,i=1}^{j=l, i=M}, \quad \psi(p_1, p_2, q) = \det A(p_1, p_2, q) \quad (23)$$

для $\overline{G}(x - x', t - t')$. Тут, як і вище, $x = (x_1, \dots, x_n)$, $p = (p_1, \dots, p_n)$,

$$p(x - x') = \sum_{i=1}^n p_i(x_i - x'_i).$$

Для побудови співвідношень, аналогічних (19), припустимо, що нулі функції $\psi(p_1, p_2, q)$ належать поверхням

$$q = q_k(p_1, p_2) \quad (k = \overline{1, K}), \quad (24)$$

а функції $\psi_{1k}(p_1, p_2)$ такі, що

$$\text{Res} \left[\frac{\varphi(p_1, p_2, q)}{\psi(p_1, p_2, q)}, q = q_k(p_1, p_2) \right] = \frac{\varphi_{1k}(p_1, p_2)}{\psi_{1k}(p_1, p_2)}, \quad (25)$$

лініям

$$p_1 = p_{1k_1}(p_2) \quad (k_1 = \overline{1, K_k}, k = \overline{1, K}). \quad (26)$$

Позначивши через $p_{2k_2}^{(k_1)}$ k_2 -й ($k_2 = \overline{1, K_{k_1}}$) корінь рівняння

$$\psi_{2k_1k_1}(p_2) = \psi_{1k}(p_{1k_1}(p_2), p_2) = 0 \quad (k_1 = \overline{1, K_k}, k = \overline{1, K}),$$

де

$$\frac{\varphi_{2k_1k_1}(p_2)}{\psi_{2k_1k_1}(p_2)} = \text{Res} \left[\frac{\varphi_{1k}(p_1, p_2)}{\psi_{1k}(p_1, p_2)}, p_1 = p_{1k_1}(p_2) \right], \quad (27)$$

аналогічно (19) визначимо

$$\begin{aligned} R_{kk_1k_2}(x - x', t - t') &= \\ &= \text{Res}[f(p_1, p_2, q), p_{1k_1}(p_{2k_2}^{(k_1)}), p_{2k_2}^{(k_1)}, q_k(p_{1k_1}(p_{2k_2}^{(k_1)}), p_{2k_2}^{(k_1)})] = \\ &= \text{Res} \left[\frac{\varphi_{2k_1k_1}(p_2)}{\psi_{2k_1k_1}(p_2)}, p_{2k_2}^{(k_1)} \right] \quad (k_2 = \overline{1, K_{k_1}}, k_1 = \overline{1, K_k}, k = \overline{1, K}). \end{aligned} \quad (28)$$

З урахуванням (28) та визначень функцій $\varphi_{2k_1k_1}(p_2)$, $\psi_{2k_1k_1}(p_2)$ для передаточної функції $G(x - x', t - t')$ рівняння (1) та передаточної матричної функції $\overline{G}(x - x', t - t')$ системи (2) аналогічно (21) маємо:

$$\left. \begin{aligned} G(x - x', t - t') \\ \overline{G}(x - x', t - t') \end{aligned} \right\} = \sum_{k=1}^K \sum_{k_1=1}^{K_k} \sum_{k_2=1}^{K_{k_1}} R_{kk_1k_2}(x - x', t - t'). \quad (29)$$

4. Запишемо узагальнення співвідношень (24)–(27) на випадок довільного n . Для цього, аналогічно (24), (26), позначимо через

$$q = q_k(p_1, \dots, p_n) \quad (k = \overline{1, K}), \quad (30)$$

$$p_1 = p_{1k_1}(p_2, \dots, p_n) \quad (k_1 = \overline{1, K_k}), \quad (31)$$

$$p_2 = p_{2k_1k_2}(p_3, \dots, p_n) \quad (k_2 = \overline{1, K_{k_1}}), \quad (32)$$

.....

$$p_{n-2} = p_{(n-2)k_1k_2\dots k_{n-2}}(p_{n-1}, p_n) \quad (k_{n-2} = \overline{1, K_{k_1\dots k_{n-3}}}), \quad (33)$$

$$p_{n-1} = p_{(n-1)k_1k_2\dots k_{n-1}}(p_n) \quad (k_{n-1} = \overline{1, K_{k_1\dots k_{n-2}}}) \quad (34)$$

гіперповерхні, поверхню та лінію, на яких обертаються в нуль функції $\psi(p_1, \dots, p_n, q)$, $\psi_{1k}(p_1, \dots, p_n), \dots, \psi_{nk_1\dots k_{n-1}}(p_n)$, визначені співвідношеннями

$$\psi(p_1, \dots, p_n, q) = \begin{cases} L(p, q) & \text{для рівняння (1),} \\ \det A(p, q) & \text{для системи (2),} \end{cases} \quad (35)$$

$$\frac{\varphi_{1k}(p_1, \dots, p_n)}{\psi_{1k}(p_1, \dots, p_n)} = \text{Res} \left[\frac{\varphi(p_1, \dots, p_n, q)}{\psi(p_1, \dots, p_n, q)}, q = q_k(p_1, \dots, p_n) \right], \quad (36)$$

$$\frac{\varphi_{jkk_1 \dots k_{j-1}}(p_j, \dots, p_n)}{\psi_{jkk_1 \dots k_{j-1}}(p_j, \dots, p_n)} =$$

$$= \text{Res} \left[\frac{\varphi_{(j-1)kk_1 \dots k_{j-2}}(p_{j-1}, \dots, p_n)}{\psi_{(j-1)kk_1 \dots k_{j-2}}(p_{j-1}, \dots, p_n)}, p_{j-1} = p_{(j-1)kk_1 \dots k_{j-1}}(p_j, \dots, p_n) \right], \quad (37)$$

$$j = \overline{2, n}.$$

Позначимо через $\bar{p}_{nk_n}^{(kk_1 \dots k_{n-1})}$ k_n -й ($k_n = \overline{1, K_{kk_1 \dots k_{n-1}}}$) корінь рівняння

$$\psi_{nkk_1 \dots k_{n-1}}(p_n) = 0,$$

а через

$$\bar{p}_{n-1} = p_{(n-1)kk_1 \dots k_{n-1}}(\bar{p}_{nk_n}^{(kk_1 \dots k_{n-1})}),$$

.....

$$\bar{p}_2 = p_{2kk_1 k_2}(\bar{p}_3, \dots, \bar{p}_{n-1}, \bar{p}_{nk_n}^{(kk_1 \dots k_{n-1})}),$$

$$\bar{p}_1 = p_{1kk_1}(\bar{p}_2, \dots, \bar{p}_{n-1}, \bar{p}_{nk_n}^{(kk_1 \dots k_{n-1})}) -$$

точки гіперповерхонь (30)–(32), поверхні (33) та лінії (34), аналогічно (29) отримаємо

$$\left. \begin{array}{l} G(x - x', t - t') \\ \bar{G}(x - x', t - t') \end{array} \right\} = \sum_{k=1}^K \sum_{k_1=1}^{K_k} \sum_{k_2=1}^{K_{kk_1}} \dots \sum_{k_n=1}^{K_{kk_1 \dots k_{n-1}}} R_{kk_1 \dots k_n}(x - x', t - t'), \quad (38)$$

де

$$R_{kk_1 \dots k_n}(x - x', t - t') = \text{Res} \left[\frac{\varphi_{nkk_1 \dots k_{n-1}}(p_n)}{\psi_{nkk_1 \dots k_{n-1}}(p_n)}, \bar{p}_{nk_n}^{(kk_1 \dots k_{n-1})} \right],$$

при визначених згідно з (35)–(37) функціях $\varphi_{nkk_1 \dots k_{n-1}}(p_n)$ та $\psi_{nkk_1 \dots k_{n-1}}(p_n)$.

Останнє закінчує процедуру побудови передаточної функції $G(x - x', t - t')$ та передаточної матриці-функції $\bar{G}(x - x', t - t')$ рівнянь (1), (2) — функцій, які є ядрами інтегральних зображень (3), (4) цих рівнянь.

5. На завершення зауважимо, що знайдені згідно з (7), (8) (для $n = 0$), (21) (для $n = 1$), (29) (для $n = 2$) та (38) (для довільного $n \geq 1$) функція $G(x - x', t - t')$ та матрична функція $\bar{G}(x - x', t - t')$ мають відповідати своїй фізичній суті і повинні задовольняти умови симетричності, неперервності та згасання на нескінченності.

З урахуванням цього запронована вище методика побудови названих передаточних функцій перевірялася на прикладах систем, для яких в рамках перетворення Лапласа–Карсона [12] та розв'язання початково-крайових задач через апарат фундаментальних розв'язків [13] досліджувалися інтеграли вигляду (5).

Так, знайдене згідно з (7),

$$G(x - x') = \frac{1}{2\lambda} \sin(\lambda|x - x'|)$$

збігається [13] з фундаментальним розв'язком рівняння Гельмгольца

$$(\partial_x^2 + \lambda^2)y(x) = \delta(x - x'),$$

а

$$G(x - x', t - t') = e^{a(x-x') + b(t-t')} \quad \text{та} \quad G(x - x', t - t') = -\frac{1}{2c}H[c(t - t') - |x - x'|]$$

(тут H — функція Хевісайда), знайдені згідно з (21), — із результатом [12] обчислення інтеграла вигляду (5) для

$$L(p, q) = (p - a)(q - b)$$

та фундаментальним розв'язком [13] хвильового рівняння

$$(c^2\partial_x^2 - \partial_t^2)y(x, t) = \delta(x - x')\delta(t - t'),$$

де наведені нами функції $G(x - x')$, $G(x - x', t - t')$ будувалися із застосуванням інших математичних підходів. Останнє підтверджує правильність запропонованого тут підходу до побудови ядер інтегральних еквівалентів лінійних диференціальних моделей динаміки розподілених просторово-часових систем.

1. Альберт А. Регрессия, псевдоинверсия, рекуррентное оценивание. — Москва: Наука, 1977. — 305 с.
2. Гантмахер А. Ф. Теория матриц. — Москва: Наука, 1967. — 287 с.
3. Кириченко Н. Ф. Псевдообращение матриц и их рекуррентность в задачах моделирования и управления // Пробл. управления и информатики. — 1995. — № 1. — С. 114–127.
4. Кириченко Н. Ф., Стоян В. А. Аналитическое представление матричных и интегральных линейных преобразований // Кибернетика и систем. анализ. — 1998. — № 3. — С. 90–104.
5. Стоян В. А. Об одном подходе к исследованию начально-краевых задач матфизики // Пробл. управления и информатики. — 1998. — № 1. — С. 79–86.
6. Кириченко Н. Ф., Стоян В. А. Построение общего решения начально-краевых задач, задач наблюдения и терминального управления для систем с распределенными параметрами // Электромагн. волны и электрон. системы. — 1999. — № 6. — С. 4–15.
7. Скопецкий В. В., Стоян В. А., Кривонос Ю. Г. Математичне моделювання прямих та обернених задач динаміки систем з розподіленими параметрами. — Київ: Наук. думка, 2001. — 361 с.
8. Скопецкий В. В., Стоян В. А., Зваридчук В. Б. Математичне моделювання динаміки розподілених просторово-часових процесів. — Київ: Сталь, 2008. — 316 с.
9. Стоян В. А. До побудови функцій Гріна для систем з розподіленими параметрами // Вычисл. и прикл. математика. — 1998. — Вып. 83. — С. 108–111.
10. Стоян В. А., Козут О. В., Крицак Я. В. Про інтегральне представлення лінійно-диференціальних рівнянь динаміки розподілених просторово-часових процесів // Вісн. Київ. нац. ун-ту. Сер. Кібернетика. — 2010. — Вып. 10. — С. 28–30.
11. Стоян В. А. Моделювання та ідентифікація динаміки систем із розподіленими параметрами: Навч. пос. — Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2008. — 201 с.
12. Диткин В. А., Прудников А. П. Справочник по операционному исчислению. — Москва: Высш. шк., 1965. — 465 с.
13. Бреббия К., Уокер С. Применение метода граничных элементов в технике. — Москва: Мир, 1982. — 248 с.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 17.01.2012

В. А. Стоян, К. В. Двирнычук

**К построению интегрального эквивалента линейных
дифференциальных моделей**

Рассматриваются линейные динамические системы, пространственно сосредоточенные или распределенные в одно-, двух- и многомерном пространстве. Предлагается алгоритм перехода от определенной уравнением и системой уравнений дифференциальной формы математической модели к ее интегральному эквиваленту.

V. A. Stoyan, K. V. Dvirnychuk

Constructing the integral equivalent of linear differential models

The paper considers linear dynamic systems dimensionally concentrated or distributed in one-, two-, and multidimensional spaces. An algorithm of transition from a mathematical model defined by a differential equation and a system of differential equations to its integral equivalent is proposed.

Член-корреспондент НАН Украины А. И. Шевченко, А. С. Миненко,
О. А. Золотухина

Численный анализ одной нелинейной математической модели

Исследуется задача Стефана с учетом конвективного движения в жидкой фазе. Построено приближенное решение задачи с применением метода малого параметра.

Постановка задачи. Пусть $\Omega \in \mathbb{R}^3$ — заданная область, граница которой $\partial\Omega$ состоит из двух замкнутых, связных гладких поверхностей Γ^+ и Γ^- , не имеющих самопересечений, причем поверхности Γ^\pm предполагаются принадлежащими классу $H^{5+\alpha}$, $0 < \alpha < 1$. Пусть далее $\Gamma_t (t \in [0, T])$ — гладкие замкнутые поверхности, лежащие внутри Ω , такие, что Γ^+ лежит внутри ограничений области, границей которой является Γ_t . Свободная поверхность Γ_t — граница раздела фаз в момент времени t — разбивает область Ω на две связные подобласти Ω_t^- и Ω_t^+ , занимаемых твердой и жидкой фазами соответственно. Требуется определить вектор скорости $\vec{V}(x, t)$, давление $p(x, t)$, распределения температур твердой и жидкой фаз $u^-(x, t)$ и $u^+(x, t)$ и свободную поверхность Γ_t по следующим условиям:

$$\frac{\vec{V}}{\partial t} + (\vec{V}\nabla)\vec{V}(x, t) + \nabla p(x, t) = \frac{1}{\text{Re}}\nabla^2\vec{V}(x, t) + \vec{f}(u^+), \quad \nabla\vec{V}(x, t) = 0, \quad (x, t) \in D_T^+, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u^+(x, t) + (\vec{V}\nabla)u^+(x, t) - a_+^2\nabla^2u^+(x, t) = 0, \quad (x, t) \in D_T^+, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}u^-(x, t) - a_-^2\nabla^2u^-(x, t) = 0, \quad (x, t) \in D_T^-, \quad (3)$$

$$u^\pm(x, t)|_{t=0} = A^\pm(x), \quad u^\pm(x, t)|_{x \in \Gamma^+ \cup \Gamma^-} = B^\pm(x, t), \quad (4)$$

$$\vec{V}(x, t)|_{t=0} = \vec{C}(x), \quad \vec{V}(x, t)|_{x \in \Gamma^+ \cup \Gamma_t} = 0, \quad (5)$$

$$u^\pm(x, t)|_{x \in \Gamma_t} = 0, \quad \sum_{i=1}^3 \left[K_- \frac{\partial u^-}{\partial x_i} - K_+ \frac{\partial u^+}{\partial x_i} \right] \cos(n, x_i) + K \cos(n, t) = 0, \quad x \in \Gamma_t, \quad (6)$$

где $D_T^\pm = \{(x, t): x \in \Omega_t^\pm, t \in (0, T)\}$; $\partial\Omega^\pm = \Gamma_t \cup \Gamma^\pm$; $\nabla = (\partial/\partial x_1, \partial/\partial x_2, \partial/\partial x_3)$; \vec{n} — нормаль к Γ_t , направлена в сторону Ω_t^+ . Предполагается, что $B^\pm(x, t) \in H^{3+\beta, (3+\beta)/2}(\Gamma^\pm \times [0, T])$, $0 < \beta < \alpha$, $A^\pm(x) \in H^{5+\alpha}(\bar{\Omega}_0^\pm)$, $\vec{C}(x) \in H^{2+\alpha}(\bar{\Omega}^+)$, где Ω_0^\pm — области, на которые разбивает Ω граница раздела фаз Γ_0 в момент времени $t = 0$ и $B^\pm(x, t) \geq \varepsilon_0 > 0$ при $(x, t) \in \Gamma^\pm \times [0, T]$.

Параметры a_\pm , K_\pm , K , Re , ε_0 считаются положительными постоянными, а $\vec{f}(u^+)$ — принадлежащей классу $C^2(R^1)$, $\vec{f}'(u^+)$ — ограниченной в R^1 . Задача (1)–(6) при малых значениях t разрешима в классе гладких функций, при этом $u^\pm \in H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}(\bar{D}_T^\pm)$, $\vec{V} \in H^{2+\beta, (2+\beta)/2}(\bar{D}_T^\pm)$, а свободная поверхность Γ_t принадлежит классу $H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}$ [1].

Настоящая работа посвящена приближенному анализу задачи (1)–(6).

Приближенное решение задачи (1)–(6). Для точек поверхности Γ_0 введем координаты $\omega = (\omega_1, \omega_2)$, через $x(\omega) \in \Gamma_0$ или через ω будем обозначать также соответствующие точки в R^3 . Далее, пусть $\vec{n}(\omega)$ — нормаль к Γ_0 , направленная внутрь Ω_0^+ . В работе [1] установлено, что поверхность Γ_t можно представить в виде $\Gamma_t = \{x = x(\omega) + \vec{n}(\omega)\rho(\omega, t)\}$ с некоторой функцией $\rho(\omega, t)$ класса $H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}(\Gamma_0 \times [0, T])$, так что $\rho(\omega, 0) = 0$.

Предположим, что при малых значениях Re неизвестные нашей задачи можно представить в виде степенного ряда:

$$u^\pm(x, t) = u_0^\pm(x) + \sum_{k=1}^{\infty} (\text{Re})^k u_k^\pm(x, t);$$

$$V_i(x, t) = V_{i0}(x) + \sum_{k=1}^{\infty} (\text{Re})^k V_{ik}(x, t), \quad i = 1, 2, 3;$$

$$\rho(\omega, t) = \sum_{k=1}^{\infty} (\text{Re})^k \rho_k(\omega, t).$$

В работах [1–8] изучены нулевые и первые приближения задачи (1)–(6) для малых чисел Re . При этом установлено, что $u_0^\pm = A^\pm(x)$, $\vec{V}_0(x) = \vec{C}(x)$, $\rho_1(\omega, t) \in H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}(\Gamma_0 \times [0, T])$, $u_1^\pm(x, t) \in H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}(\overline{D_T^\pm})$, причем $\rho_1(\omega, t)$ находим как неподвижную точку сжимающегося оператора M_1 :

$$M_1 \rho_1 = \frac{1}{K} \int_0^t \left(K_- \frac{\partial u_1^-}{\partial n} - K_+ \frac{\partial u_1^+}{\partial n} + f(x, t) \right) dt, \quad x(\omega) \in [0, T],$$

а $f_1(x, t)$ — некоторая функция класса $H^{2+\alpha, (2+\alpha)/2}$.

Приближенное построение поверхности Γ_t . Рассмотрим случай, когда $B^\pm = B^\pm(x)$ и $\Omega = \{(x_1, x_2, x_3) : r^2 < x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 < R^2\}$. Тогда нулевое приближение находим как решение следующей задачи:

$$\begin{cases} \nabla^2 u^\pm(x) = 0, & x \in \Omega_0^\pm, & A^\pm(x)|_{\Gamma^\pm} = B^\pm(x), & u^\pm(x)|_{\Gamma_0} = 0, \\ \vec{C}(x) = 0, & x \in \overline{\Omega_0^\pm}, & |\nabla u^-(x)| - |\nabla u^+(x)| = 0, & x \in \Gamma_0. \end{cases} \quad (7)$$

Заметим, что замена $\tilde{u}^- = K_- u^-$ при $x \in \Omega^-$ и $\tilde{u}^+ = K_+ u^+$, если $x \in \Omega^+$ сводит задачу (7) к случаю $|\nabla u^-(x)| = |\nabla u^+(x)|$, $x \in \Gamma_0$. Поэтому в дальнейшем будем считать, что это условие выполнено. Нулевое приближение $u_0^\pm(x)$, Γ_0 найдем из условия минимума функционала $Y(u_0^\pm, \Gamma_0) = \iiint_{\Omega} |\nabla u|^2 dx_1 dx_2 dx_3$ (здесь $\Omega = \Omega_0^+ \cup \Omega_0^-$ и $u = u^-$ при $x \in \Omega^-$ и $u = u^+$, если $x \in \Omega^+$).

Далее, рассматривая функционал Y в сферических координатах, получим

$$Y(u_0) = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_r^R \left(u_\rho^2 + \frac{1}{\rho^2} u_\theta^2 + \frac{1}{\rho^2 \sin^2 \theta} u_\varphi^2 \right) \rho^2 \sin \theta d\varphi d\theta d\rho.$$

Минимум функционала ищем в следующем виде:

$$u = B^+ + \frac{R^2 - \rho^2}{R^2 - r^2} (B^- + B^+) + (R^2 - \rho^2)(\rho^2 - r^2) \sum_{k=0}^{\infty} C_k \rho^k.$$

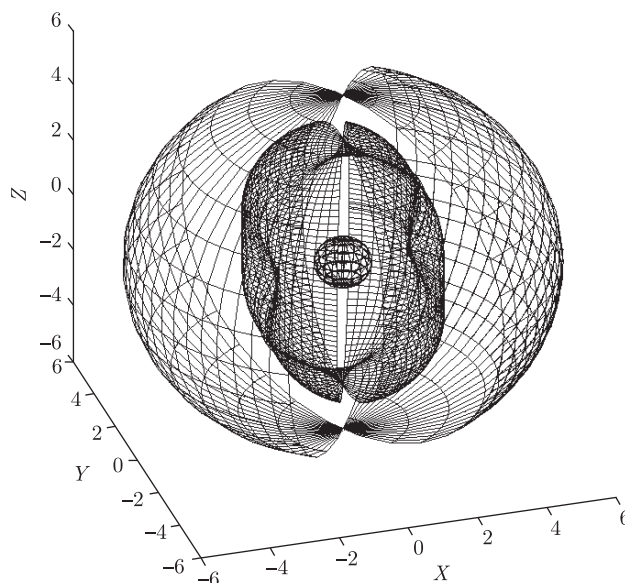


Рис. 1

Неизвестные коэффициенты C_K определяются методом Ритца. В частности, в случае нулевого приближения

$$u_0 = B^+ + \frac{R^2 - \rho^2}{R^2 - r^2}(B^- + B^+) + (R^2 - \rho^2)(\rho^2 - r^2)C_0,$$

из уравнения $\partial Y(u_0)/\partial C_0 = 0$ определим коэффициент C_0 . Справедлива следующая теорема.

Теорема. *Поверхность Γ_0 представляет собой поверхность класса C^∞ , не имеющую самопересечений и расположенную относительно Γ^+ и Γ^- аналогично поверхности Γ_t в задаче (1)–(6).*

Доказательство следует из принципа максимума, примененного к гармонической функции $\Psi(x) = -\frac{\partial u_0(x)}{\partial \vec{r}}$ оценок $-\frac{\partial u_0(x)}{\partial \vec{r}} \Big|_{\bar{\Omega}} \geq \tilde{\varepsilon}_0 > 0$ и теоремы о неявной функции, примененной к $\Psi(x)$. Здесь \vec{r} — радиус-вектор точки x .

Отсюда следует, что поверхность $\Gamma_0: \rho = \rho_0(\varphi, \theta)$ можно найти из условия $u_0(\varphi, \theta, \rho_0(\varphi, \theta)) = 0$. Тогда для поверхности Γ_t можно воспользоваться уравнением [2]:

$$\Gamma_t = \rho(\varphi, \theta, t) = \rho_0(\varphi, \theta) - \operatorname{Re} \frac{u_1^\pm(\varphi, \theta, t)}{|\nabla A^\pm(\varphi, \theta)|} + o(\operatorname{Re}).$$

На рис. 1 представлена поверхность Γ_t при следующих значениях параметров: $t = 200$, $R = 6$, $r = 0,8$, $-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/3$, $-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2$, $B^+ = 3[\cos^2 \theta + \cos^2 \varphi]$, $B^- = -0,35[\cos^2 \theta + \cos^2 \varphi] - 0,1$. Свободная поверхность Γ_t расположена между сферами радиусов R и r .

Предложенный алгоритм построения поверхности Γ_t позволяет исследовать эту поверхность в зависимости от параметров задачи (1)–(6).

1. Шевченко А. И., Миненко А. И. Задача Стефана при наличии конвекции // Доп. НАН України. – 2012. – № 1. – С. 20–25.
2. Миненко А. С. Вариационные задачи со свободной границей. – Киев: Наук. думка, 2005. – 341 с.

3. Шевченко А. И., Миненко А. С. Приближенный анализ многомерной конвективной задачи Стефана // Доп. НАН України. – 2010. – № 4. – С. 30–34.
4. Шевченко А. И., Миненко А. С. Приближенный анализ стационарной конвективной задачи Стефана // Там само. – 2010. – № 5. – С. 36–40.
5. Шевченко А. И., Миненко А. С. Приближенный анализ пространственной конвективной задачи Стефана // Там само. – 2010. – № 10. – С. 29–33.
6. Миненко А. С. Исследование одной конвективной задачи Стефана методом Ритца // Укр. мат. журн. – 2007. – **59**, № 11. – С. 1546–1556.
7. Миненко А. С. О минимизации одного интегрального функционала методом Ритца // Там само. – 2007. – **58**, № 10. – С. 1385–1394.
8. Шевченко А. И., Миненко А. С. Математическое моделирование процессов кристаллизации металла с учетом конвекции и примесей // Доп. НАН України. – 2011. – № 6. – С. 35–39.

Институт информатики и искусственного
интеллекта ДонНТУ, Донецк

Поступило в редакцию 20.02.2012

Член-корреспондент НАН України **А. І. Шевченко, А. С. Міненко,
О. А. Золотухіна**

Числовий аналіз однієї нелінійної математичної моделі

Досліджується задача Стефана з урахуванням конвекції в рідині. Із застосуванням методу малого параметра побудовано наближений розв'язок задачі.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **A. I. Shevchenko, A. S. Minenko,
O. A. Zolotukhina**

Numerical analysis of a nonlinear mathematical model

The Stefan convection problem in the liquid phase is investigated. The approximate solution is constructed by using the method of small parameter.



УДК 532.59:534.29

© 2012

О. П. Жук, академік НАН України В. Д. Кубенко, Я. О. Жук

Про радіаційну силу плоскої акустичної хвилі, яка діє на тверде сферичне тіло в заповненій рідиною циліндричній порожнині

Досліджено дію радіаційної сили на сферичне тіло в циліндричній порожнині, заповненій стисливою рідиною. Встановлено залежність величини і напрямку дії сили від частоти та відношення радіусів тіла і циліндричної порожнини.

Для твердого сферичного тіла, яке знаходиться в заповненій ідеальною стисливою рідиною циліндричній порожнині, розглядається задача щодо визначення дії на нього радіаційної сили, обумовленої радіаційним тиском акустичного поля. При формулюванні задачі в лагранжовій системі координат радіаційний тиск визначається як середнє в часі значення акустичного тиску [1] на поверхню сферичного тіла. Такий підхід вимагає при обчисленні акустичного тиску враховувати величини другого порядку. Для визначення тиску з такою точністю можна обмежитися потенціалами поля швидкості, одержаними із розв'язків лінійної задачі дифракції [2, 3]. У зв'язку з цим будемо дотримуватися такої схеми дослідження. На першому етапі визначимо потенціали поля швидкості рідини в порожнині з твердим сферичним тілом. На другому — обчислимо результуючу силу дії рідини на тіло. І на третьому етапі осередненням в часі відфільтруємо її сталу складову.

Постановка задачі дифракції. Задачу першого етапу — визначення потенціалів поля швидкості рідини в порожнині — сформулюємо в лінійній постановці, дотримуючись робіт [4, 5]. Вважатимемо, що кругова циліндрична порожнина радіусом ρ_0 з абсолютно твердими стінками заповнена ідеальною стисливою рідиною густиною γ , в якій звук поширюється зі швидкістю a_0 . В циліндричній порожнині розміщено нерухоме сферичне тіло радіусом r_0 , центр якого знаходиться на осі порожнини. Виберемо циліндричну систему координат $O\rho z\varphi$, вісь Oz якої направлена вздовж осі циліндричної порожнини (рис. 1), і сферичну систему координат $Or\theta\varphi$. Нехай у додатному напрямі осі Oz поширюється плоска акустична хвиля, яка описується потенціалом

$$\Phi_0 = A \exp[i(kz - \omega t)], \quad (1)$$

де A — амплітуда; $k = \omega/a_0$ — хвильове число; ω — кутова частота; t — час.

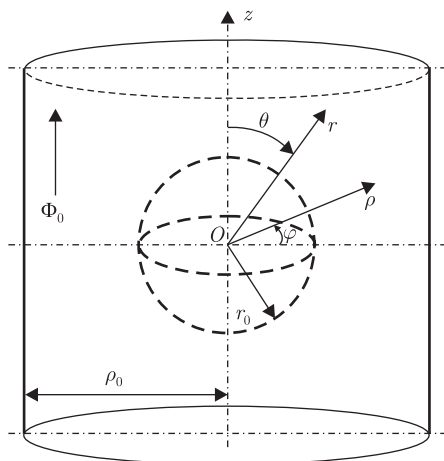


Рис. 1

Потенціал Φ_0 є розв'язком лінійного хвильового рівняння. Введемо безрозмірні величини

$$\begin{aligned} \bar{\rho} &= \frac{\rho}{\rho_0}; & \bar{r} &= \frac{r}{\rho_0}; & \bar{t} &= \frac{ta_0}{\rho_0}; & \bar{\omega} &= \frac{\omega\rho_0}{a_0}; & \bar{v} &= \frac{v}{a_0}; \\ \bar{\Phi} &= \frac{\Phi}{\rho_0 a_0}; & \bar{p} &= \frac{p}{\gamma a_0^2}; & \bar{z} &= \frac{z}{\rho_0}. \end{aligned} \quad (2)$$

У співвідношеннях (2) \mathbf{v} — вектор швидкості рідини; $v = |\mathbf{v}|$; p — акустичний тиск. В подальшому будуть використовуватися тільки безрозмірні величини, тому позначати їх рискою не будемо. В безрозмірних величинах потенціал (1) і лінійне хвильове рівняння мають відповідно такий вигляд:

$$\Phi_0 = A \exp[i\omega(z - t)]; \quad (3)$$

$$\Delta\Phi + \omega^2\Phi = 0, \quad (4)$$

де Δ — диференціальний оператор Лапласа.

Визначення потенціалів хвильового поля в порожнині зводиться до розв'язування лінійної задачі розсіювання акустичної хвилі (3) на сферичному тілі і на внутрішній поверхні порожнини: знаходження розв'язків рівняння (4), які описують поле вектора швидкості рідини

$$\mathbf{v} = \text{grad } \Phi, \quad \Phi = \Phi_0 + \Phi_{\text{sph}} + \Phi_{\text{cyl}} \quad (5)$$

і задовольняють граничні умови на поверхні порожнини

$$v_{\rho}|_{\rho=1} = \left. \frac{\partial\Phi}{\partial\rho} \right|_{\rho=1} = 0, \quad (6)$$

на поверхні сферичного тіла

$$v_r|_{r=r_0} = \left. \frac{\partial\Phi}{\partial r} \right|_{r=r_0} = 0 \quad (7)$$

і умови випромінення Зоммерфельда на нескінченності

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r \left(\frac{d\Phi}{dr} - i\omega\Phi \right) = 0, \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \Phi = 0. \quad (8)$$

Оскільки рідина знаходиться в порожнині, хвильові збурення повинні бути обмеженими

$$\Phi \rightarrow \text{const}, \quad \text{коли} \quad \rho \rightarrow 0. \quad (9)$$

В (5) позначено: Φ_{sph} — потенціал, що описує розсіяну на сферичному тілі хвилю; Φ_{cyl} — потенціал, що описує хвилю, розсіяну на поверхні порожнини.

Визначення потенціалів хвильового поля. Розв'язки Φ_{sph} рівняння (4) в сферичній системі координат будемо шукати у вигляді узагальненого ряду Фур'є за сферичними хвильовими функціями

$$\Phi_{\text{sph}}(r, \theta) = \sum_{n=0}^{n=\infty} A_n h_n^{(1)}(\omega r) P_n(\cos \theta), \quad (10)$$

а розв'язки Φ_{cyl} рівняння (4) в циліндричній системі координат — у вигляді

$$\Phi_{\text{cyl}}(\rho, z) = \int_{-\infty}^{\infty} B(\xi) J_0(\sqrt{\omega^2 - \xi^2} \rho) e^{i\xi z} d\xi. \quad (11)$$

В (10) і (11) $h_n^{(1)}(x)$ — сферична функція Ганкеля першого роду; $P_n(x)$ — поліноми Лежандра; $J_0(x)$ — циліндрична функція Бесселя нульового порядку; A_n — невідомі сталі; $B(\xi)$ — невідома густина; ξ — стала розділення. Співвідношення (10) і (11) задовольняють відповідно умови (8) і (9).

Складові (3), (10) і (11) загального розв'язку Φ (5) записані в різних системах координат, зв'язаних з конкретними тілами. Для того щоб задовольнити відповідно граничні умови (6) і (7), загальний потенціал Φ необхідно записати у відповідній системі координат. Для цього використаємо співвідношення (6), (7), (8), які дозволяють циліндричні хвильові функції виразити через сферичні хвильові функції і навпаки. В результаті потенціал (10), записаний у сферичній системі координат, в циліндричній системі координат має такий вигляд:

$$\Phi_{\text{sph}}(\rho, z) = \int_{-\infty}^{\infty} A(\xi) H_0(\sqrt{\omega^2 - \xi^2} \rho) e^{i\xi z} d\xi; \quad (12)$$

$$A(\xi) = \frac{1}{2\omega} \sum_{n=0}^{n=\infty} A_n i^{-n} P_n\left(\frac{\xi}{\omega}\right),$$

а потенціал (11), записаний у циліндричній системі координат, в сферичній —

$$\Phi_{\text{cyl}}(r, \theta) = \sum_{n=0}^{n=\infty} B_n j_n(\omega r) P_n(\cos \theta); \quad (13)$$

$$B_n = i^n (2n + 1) \int_{-\infty}^{\infty} B(\xi) P_n\left(\frac{\xi}{\omega}\right) d\xi.$$

Потенціал Φ_0 первинної хвилі (3) також запишемо в сферичній системі координат

$$\Phi_0(r, \theta) = \sum_{n=0}^{n=\infty} A i^n (2n+1) j_n(\omega r) P_n(\cos \theta). \quad (14)$$

У формулах (12)–(14) $j_n(x)$ — сферичні функції Бесселя; $H_0(x)$ — циліндрична функція Ганкеля нульового порядку.

Загальний потенціал (5) в циліндричній системі координат $O\rho\varphi z$, беручи до уваги (3), (11) і (12), запишемо так:

$$\Phi(\rho, z) = A e^{i\omega z} + \int_{-\infty}^{\infty} A(\xi) H_0(\sqrt{\omega^2 - \xi^2} \rho) e^{i\xi z} d\xi + \int_{-\infty}^{\infty} B(\xi) J_0(\sqrt{\omega^2 - \xi^2} \rho) e^{i\xi z} d\xi. \quad (15)$$

Для потенціалу (15), який задовольняє граничну умову (6), справедливе таке співвідношення:

$$\int_{-\infty}^{\infty} [A(\xi) H_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2}) + B(\xi) J_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2})] \sqrt{\omega^2 - \xi^2} e^{i\xi z} dz = 0. \quad (16)$$

Із (16), беручи до уваги формулу (12) для $A(\xi)$, одержуємо для обчислення $B(\xi)$ через невідомі сталі A_n такий вираз:

$$B(\xi) = -\frac{1}{2\omega} \frac{H_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2})}{J_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2})} \sum_{n=0}^{n=\infty} A_n i^{-n} P_n\left(\frac{\xi}{\omega}\right). \quad (17)$$

У сферичній системі координат $Or\theta\varphi$ загальний потенціал (5), беручи до уваги (10), (13) і (14), запишемо так:

$$\Phi(r, \theta) = \sum_{n=0}^{n=\infty} [A i^n (2n+1) j_n(\omega r) + A_n h_n^{(1)}(\omega r) + B_n j_n(\omega r)] P_n(\cos \theta). \quad (18)$$

У формулах (10)–(15) і (18) співмножник $\exp(-i\omega t)$ не наведено.

Для потенціалу (18), який узгоджується з граничними умовами (8), має місце таке рівняння:

$$\sum_{n=0}^{n=\infty} \left[A_n \frac{dh_n^{(1)}(\omega r_0)}{dr} + B_n \frac{dj_n(\omega r_0)}{dr} + A i^n (2n+1) \frac{dj_n(\omega r_0)}{dr} \right] P_n(\cos \theta) = 0. \quad (19)$$

Беручи до уваги формулу (13) для B_n і формулу (17) для $B(\xi)$, одержуємо із (19) нескінченну систему алгебраїчних рівнянь для обчислення невідомих коефіцієнтів A_n

$$A_n - \frac{(2n+1)}{2\omega} \frac{j_n'(\omega r_0)}{h_n^{(1)'}(\omega r_0)} \sum_{m=0}^{m=\infty} i^{n-m} q_{mn} A_m = -A i^n (2n+1) \frac{j_n'(\omega r_0)}{h_n^{(1)'}(\omega r_0)}(\omega r_0) \quad (20)$$

$$(n = 0, 1, 2, \dots).$$

У рівняннях (20) коефіцієнти g_{mn} мають такий вигляд:

$$q_{mn} = 2 \int_0^{\infty} \frac{H_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2})}{J_1(\sqrt{\omega^2 - \xi^2})} P_n\left(\frac{\xi}{\omega}\right) P_n\left(\frac{\xi}{\omega}\right) d\xi. \quad (21)$$

Відзначимо, що для непарних сум індексів $n + m$ коефіцієнти g_{mn} дорівнюють нулю. Система рівнянь має єдиний розв'язок, який знаходиться методом редукції. Задана точність забезпечується шляхом порівняння результатів при послідовному збільшенні числа рівнянь. Обчислені коефіцієнти A_n дають можливість вирахувати коефіцієнти B_n і визначити загальний потенціал (18) в сферичній системі координат.

Визначення радіаційної сили. Радіаційну силу, яка діє на сферичне тіло, обчислимо, осереднивши в часі відповідну гідродинамічну силу. Завдяки осовій симетрії акустичного поля відносно осі Oz гідродинамічна сила направлена вздовж цієї осі і вираховується за формулою

$$F_z = -2\pi r_0^2 \int_0^{\pi} p \sin \theta \cos \theta d\theta. \quad (22)$$

Тиск p в (22) визначаємо з точністю до величин другого порядку. Для цього скористаємося формулою для обчислення тиску [2], яка в безрозмірних величинах для нерухомого сферичного тіла має такий вигляд:

$$p = -\frac{1}{2r_0^2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial t} \right)^2. \quad (23)$$

В (23) враховано, що сферичне тіло нерухоме, а Φ — потенціал (18). Вкажемо, що у формулі (23), як впливає з її структури, необхідно брати дійсні частини похідних потенціалу Φ .

Осереднюючи за періодом первинної хвилі при умові (23) гідродинамічну силу (22), в результаті одержуємо формулу для обчислення радіаційної сили, що діє на сферичне тіло вздовж осі Oz

$$\langle F_z \rangle = 2\pi \sum_{n=0}^{n=\infty} \frac{n+1}{(2n+1)(2n+3)} [n(n+2) - \alpha^2] (R_n R_{n+1} + S_n S_{n+1}), \quad (24)$$

де

$$\begin{aligned} \alpha &= \omega r_0; & S_n &= K_n + M_n + G_n; & R_n &= L_n + T_n + N_n; \\ K_n &= (-1)^n (4n+1) j_{2n}(\omega r_0); & L_n &= (-1)^n (4n+3) j_{2n+1}(\omega r_0); \\ M_n &= \operatorname{Re} A_n j_n(\omega r_0) - \operatorname{Im} A_n y_n(\omega r_0); & N_n &= \operatorname{Re} A_n y_n(\omega r_0) + \operatorname{Im} A_n j_n(\omega r_0); \\ G_n &= \operatorname{Re} B_n j_n(\omega r_0); & T_n &= \operatorname{Im} B_n j_n(\omega r_0). \end{aligned} \quad (25)$$

Аналіз результатів числового дослідження радіаційної сили. Числові розрахунки проводилися в безрозмірних величинах (2). За нормувальні параметри були взяті механічні характеристики стисливої рідини (води): швидкість хвилі $a_0 = 1500$ м/с, густина $\gamma = 1000$ кг/м³. Розглядалася плоска хвиля (3) з густиною потоку енергії $I = 175,5$ Вт/м².

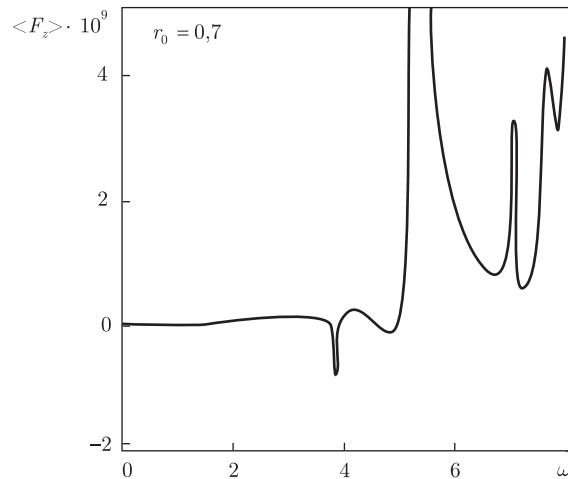


Рис. 2

Безрозмірна амплітуда A в формулі (3) дорівнює $0,3 \cdot 10^{-5}$. Графік залежності радіаційної сили від частоти хвилі для сферичного тіла безрозмірного радіуса (2) $r_0 = 0,7$ зображено на рис. 2. Аналіз графіка показує характерні особливості дії радіаційної сили на сферичне тіло в циліндричній порожнині:

залежно від частоти хвилі радіаційна сила може бути направлена як у напрямі поширення хвилі, так і в зворотному напрямі;

в околі деяких частот зміна величини радіаційної сили має характер, близький до резонансного: на графіках залежності радіаційної сили від частоти в околі резонансних частот з'являються максимуми. Очевидно, резонансні частоти є власними частотами механічної системи — заповнена рідиною циліндрична порожнина з сферичним твердим тілом.

1. Зарембо Л. К., Красильников В. А. Введение в нелинейную акустику. — Москва: Наука, 1966. — 520 с.
2. King L. V. On the acoustic radiation pressure on spheres // Proc. Roy. Soc. Ser. A. — 1934. — **147**, No 861. — P. 246–265.
3. Guz A. N., Zhuk A. P. Motion of solid particles in a liquid under the action of an acoustic field: the mechanism of radiation pressure // Int. Appl. Mech. — 2004. — **40**, No 3. — P. 246–265.
4. Kubenko V. D., Dzyuba V. V. Interaction of infinite thin elastic cylindrical shell and a pulsating spherical inclusion in potential flow of ideal compressible liquid: internal axisymmetric problem // Ibid. — 2009. — **45**, No 3. — P. 297–312.
5. Kubenko V. D., Dzyuba V. V. Diffraction of a plane acoustic wave by a rigid sphere in a cylindrical cavity: an axisymmetric problem // Ibid. — 2009. — **45**, No 4. — P. 424–432.
6. Гузь А. Н., Головчан В. Т. Дифракция упругих волн в многосвязных телах. — Киев: Наук. думка, 1972. — 254 с.
7. Ерофеенко В. Т. Связь между основными решениями в цилиндрических и сферических координатах уравнений Гельмгольца и Лапласа // Изв. АН БССР. Сер. физ.-мат. наук. — 1972. — № 4. — С. 42–46.
8. Кубенко В. Д. Задачи дифракции стационарных волн на совокупности цилиндрических и сферических тел в жидкости // Прикл. механика. — 1987. — **23**, № 6. — С. 111–117.

А. П. Жук, академик НАН Украины В. Д. Кубенко, Я. А. Жук

О радиационной силе плоской акустической волны, действующей на сферическое тело в заполненной жидкостью цилиндрической полости

Исследовано действие радиационной силы на сферическое тело в цилиндрической полости, заполненной сжимаемой жидкостью. Установлены зависимости величины и направления действия силы от частоты и отношения радиусов тела и цилиндрической полости.

O. P. Zhuk, Academician of the NAS of Ukraine V. D. Kubenko, Ya. O. Zhuk

On the radiation force of a plane acoustic wave acting on a solid spherical body in a liquid-filled cylindrical cavity

The radiation force effect on a spherical body located in the cylindrical cavity filled with a compressible liquid is studied. The dependences of the magnitude and direction of the force on the frequency and the ratio of sphere and cylinder radii are investigated.

УДК 531.36

© 2012

Д. М. Ли́ла

Эксцентричная форма неустойчивости вращающегося составного плоского кругового диска

(Представлено академиком НАН Украины А. А. Мартынюком)

Предложен способ исследования методом малого параметра возможной потери устойчивости вращающегося составного плоского кругового диска. Получено в первом приближении характеристическое уравнение относительно критического радиуса пластической зоны. Численно найдены значения критической угловой скорости вращения при различных параметрах диска.

Способ применения приближенного метода малого параметра к решению задач о потере устойчивости [1] и несущей способности [2] простейших быстро вращающихся упругих дисков [3, 4] по эксцентричной и самоуравновешенной форме предложен в работах [5–8]. Этот способ был уточнен и получил дальнейшее развитие в исследованиях [9–11], посвященных динамике возмущения формы границы [12] как сплошных, так и кольцевых плоских и ступенчатых круговых дисков, а также дисков произвольного профиля. В указанных работах удалось учесть геометрию дисков и характер их нагружения в условиях сопряжения на неизвестной упруго-пластической границе [13] для вычисления критической угловой скорости, определяющей потерю устойчивости. Построена схема расчета самоуравновешенной формы потери устойчивости простейшего неоднородного сплошного кругового диска.

В настоящей работе указанный результат распространен и на эксцентричную форму потери устойчивости. Эффективность предложенного способа изучения неустойчивости составных дисков проиллюстрирована примерами (см. пункт 5).

1. Постановка задачи. Объектом исследования является быстро вращающийся составной плоский круговой диск D. Возрастающие с увеличением скорости вращения диска центробежные нагрузки влекут значительное его радиальное растяжение. Это приводит к появлению и значительному росту пластических зон вплоть до критических размеров, при которых диск принимает новую плоскую равновесную форму.

Диск представим выполненным в виде единого целого путем жесткого соединения однородного и изотропного сплошного кругового диска D1 радиусом a и однородного изотропного кругового кольцевого диска D2 с внутренним радиусом a и внешним радиусом b . Предел текучести материала диска D1 обозначим σ_{s1} , модуль упругости — E_1 , плотность — γ_1 , коэффициент Пуассона — ν_1 . Одноименные параметры материала диска D2 обозначим σ_{s2} , E_2 , γ_2 и ν_2 соответственно.

Остановимся на эксцентричной (и мало отличающейся от круговой) форме потери устойчивости диска D, когда уравнение внешней его границы с точностью до бесконечно малых первого порядка представимо в виде

$$r = b + d \cos \theta, \quad d = \text{const},$$

или

$$\rho = 1 + \delta \cos \theta, \tag{1}$$

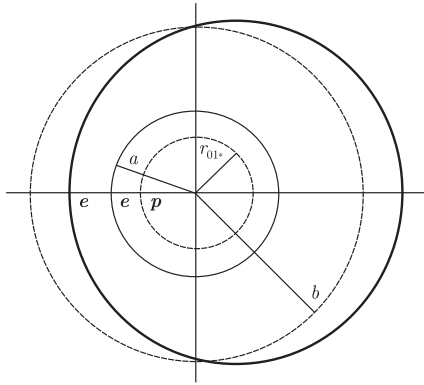


Рис. 1

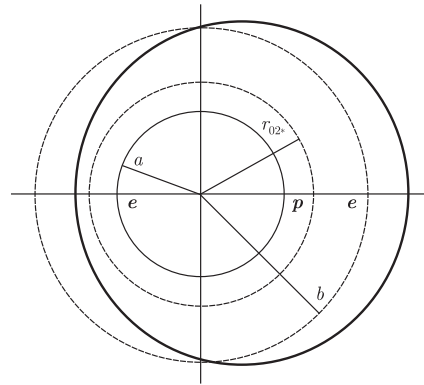


Рис. 2

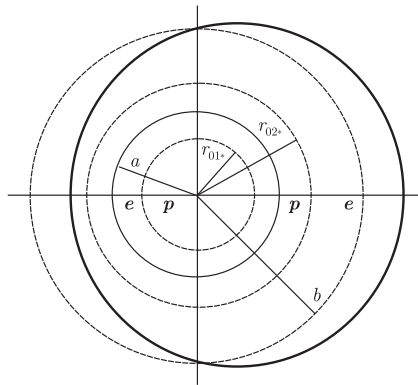


Рис. 3

где $\rho = r/b$ — безразмерный текущий радиус; δ — малый параметр; θ — полярный угол. Предмет исследований составляет механизм развития эксцентричной формы неустойчивости. Он может реализоваться по сценарию (а) D1peD2e, когда центральная круговая область радиуса $r_{01*} < a$ диска D1 пластическая, тогда как внешняя кольцевая область диска D1 и весь диск D2 в момент потери устойчивости пребывают в упругом состоянии (рис. 1); по сценарию (б) D1eD2pe, когда кольцевая пластическая зона радиуса $r_{02*} > a$ примыкает в D2 к окружности $r = a$, а диск D1 полностью упругий (рис. 2); по сценарию (в) D1peD2pe с образованием двух пластических зон соответствующих радиусов (рис. 3).

Постоянную угловую скорость вращения диска D обозначим ω , а текущий радиус пластической зоны невозмущенного диска — r_{01} или/и r_{02} .

Требуется для описываемой зависимостью (1) формы границы диска получить в первом приближении характеристическое уравнение для критического радиуса пластической зоны $r_0 = r_{0*}$ и определить соответствующую величину критической угловой скорости вращения $\omega = \omega_*$. Напомним, что для этого нужно установить условие существования нетривиальных решений системы линейных однородных уравнений

$$\begin{aligned} \sigma_{rr} + \frac{d\sigma_{rr}^0}{dr}u &= 0 \quad \text{при} \quad r = b, \\ \sigma_{r\theta} - \frac{\sigma_{\theta\theta}^0 - \sigma_{rr}^0}{b} \frac{du}{d\theta} &= 0 \quad \text{при} \quad r = b, \\ \sigma_{r\theta} &= 0 \quad \text{при} \quad r = r_0 \end{aligned}$$

относительно произвольных постоянных, входящих в выражения для компонент напряжений и перемещений σ_{rr} , $\sigma_{r\theta}$ и u , определяющих возмущенное напряженно-деформированное состояние вращающегося диска D. Указанные линеаризованные возмущения первого порядка малости удовлетворяют дифференциальным уравнениям равновесия плоской задачи и уравнениям связи между напряжениями и перемещениями [4] в частных производных, тогда как невозмущенное напряженное состояние (обозначено верхним индексом 0) определено обыкновенными дифференциальными уравнениями квазистатического равновесия [4] и уравнениями связи в упругой зоне или условием текучести Сен-Венана — в пластической зоне.

2. Решение в случае D1peD2e. Невозмущенное напряженное состояние диска D (см. рис. 1) имеет следующий вид:

$$\sigma_{\theta\theta} = \begin{cases} s, & \rho \in [0, \beta_0], \\ C_1 + \frac{C_2}{\rho^2} - \frac{\sigma_1(3\nu_1 + 1)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [\beta_0, \beta], \\ C_3 \left(1 + \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}} - \frac{\sigma_2(3\nu_2 + 1)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in (\beta, 1], \end{cases} \quad (2)$$

$$\sigma_{rr} = \begin{cases} s - \frac{\sigma_1}{3\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [0, \beta_0], \\ C_1 - \frac{C_2}{\rho^2} - \frac{\sigma_1(\nu_1 + 3)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [\beta_0, \beta], \\ C_3 \left(1 - \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}}(1 - \rho^2), & \rho \in [\beta, 1]. \end{cases} \quad (3)$$

Здесь $\sigma_{\theta\theta}$ и σ_{rr} — касательное и радиальное напряжения, отнесенные к σ_{s2} , $\sigma_1 = \gamma_1 b^2 \omega^2$, $\sigma_2 = \gamma_2 b^2 \omega^2$;

$$\begin{aligned} C_1 &= s + 2\Gamma(3\nu_1 + 1)\beta_0^2 x, & C_2 &= \Gamma(3\nu_1 + 1)\beta_0^4 x, \\ C_3 &= \{s + [m + \Gamma(3\nu_1 + 1)(2 - \beta^{-2}\beta_0^2)\beta_0^2]x\}\{1 - \beta^{-2}\}^{-1}, \\ x &= \frac{s}{24\Gamma} \frac{\omega^2}{q_1^2} = \frac{1}{24} \frac{\omega^2}{q_2^2} = -s\{1 + \beta^2 + (\varepsilon + k)(1 - \beta^2)\}\{(1 + \beta^2)[m + \Gamma(3\nu_1 + 1) \times \\ &\quad \times (2 - \beta^{-2}\beta_0^2)\beta_0^2] + (1 - \beta^2)[l + \Gamma(3\nu_1 + 1)\{2(\varepsilon + k) + \beta^{-2}(\varepsilon - k)\beta_0^2\}\beta_0^2]\}^{-1}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{r_{01}}{b}, & \beta &= \frac{a}{b}, & s &= \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{s2}}, & \Gamma &= \frac{\gamma_1}{\gamma_2}, & \varepsilon &= \frac{E_2}{E_1}, & k &= \nu_2 - \varepsilon\nu_1, \\ l &= -3\{\nu_2 + 3 + \beta^2\{\Gamma[\varepsilon(3\nu_1 + 1) + k(\nu_1 + 3)] - (3\nu_2 + 1)\}\}, \\ m &= -3\{\nu_2 + 3 + \beta^2[\Gamma(\nu_1 + 3) - (\nu_2 + 3)]\}, & q_1 &= b^{-1}\sqrt{\sigma_{s1}\gamma_1}, & q_2 &= b^{-1}\sqrt{\sigma_{s2}/\gamma_2}. \end{aligned}$$

Учтем далее результаты работ [5, 6, 8, 9], в которых доказано, что единственным критическим значением радиуса пластической зоны однородного сплошного диска с эксцентричной формой неустойчивости является $\beta_{0*} = 0$. Ссылаясь на это доказательство, без нахождения возмущенного состояния диска D укажем на основании (2) и (3) формулу для определения критической скорости вращения, соответствующей $\beta_{0*} = 0$:

$$\omega_*^2 = -24sq_2^2\{1 + \beta^2 + (\varepsilon + k)(1 - \beta^2)\}\{m(1 + \beta^2) + l(1 - \beta^2)\}^{-1}. \quad (4)$$

3. Решение в случае D1eD2ре. Теперь невозмущенное напряженное состояние исследуемого составного диска D (см. рис. 2) следует принять в виде

$$\sigma_{\theta\theta} = \begin{cases} C_1 - \frac{\sigma_1(3\nu_1 + 1)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [0, \beta), \\ 1, & \rho \in (\beta, \beta_0], \\ C_3 \left(1 + \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}} - \frac{\sigma_2(3\nu_2 + 1)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [\beta_0, 1], \end{cases} \quad (5)$$

$$\sigma_{rr} = \begin{cases} C_1 - \frac{\sigma_1(\nu_1 + 3)}{8\sigma_{s2}}\rho^2, & \rho \in [0, \beta], \\ 1 - \frac{\sigma_2}{3\sigma_{s2}}\rho^2 + \frac{C_2}{\rho}, & \rho \in [\beta, \beta_0], \\ C_3 \left(1 - \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}}(1 - \rho^2), & \rho \in [\beta_0, 1], \end{cases} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_0 &= \frac{r_{02}}{b}, \quad C_1 = \{1 + 3\beta^2\Gamma[\varepsilon(3\nu_1 + 1) + k(\nu_1 + 3)]x\}\{\varepsilon + k\}^{-1}, \\ C_2 &= \beta\{1 - (\varepsilon + k) + \beta^2[8(\varepsilon + k) - 6\Gamma\varepsilon(1 - \nu_1)]x\}\{\varepsilon + k\}^{-1}, \\ C_3 &= \{1 - 3[\nu_2 + 3 - (3\nu_2 + 1)\beta_0^2]x\}\{1 + \beta_0^{-2}\}^{-1}, \\ x &= \{\varepsilon + k + 0,5\beta(1 - (\varepsilon + k))(1 + \beta_0^2)\beta_0^{-1}\}\{(\varepsilon + k)[3(\nu_2 + 3) - (3\nu_2 + 1)(2 - \beta_0^2)\beta_0^2] - \\ &\quad - \beta^3[4(\varepsilon + k) - 3\Gamma\varepsilon(1 - \nu_1)](1 + \beta_0^2)\beta_0^{-1}\}^{-1}. \end{aligned}$$

Возмущенное состояние внешней упругой однородной кольцевой области D2e может быть записано следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma_{rr}^e &= (2A\rho + (3m_2 + 1)B\rho^{-1} - 2C\rho^{-3})\cos\theta, \\ \sigma_{\theta\theta}^e &= (6A\rho - (m_2 - 1)B\rho^{-1} + 2C\rho^{-3})\cos\theta, \\ \sigma_{r\theta}^e &= (2A\rho - (m_2 - 1)B\rho^{-1} - 2C\rho^{-3})\sin\theta, \\ u^e &= \frac{\sigma_{s2}}{E_2} \left(\frac{m_2 - 3}{m_2}A\rho^2 + \frac{(m_2 + 1)(3m_2 - 1)}{m_2}B\ln\rho + \frac{m_2 + 1}{m_2}C\rho^{-2} \right) \cos\theta, \end{aligned}$$

где $m_2 = \nu_2^{-1}$, σ_{rr}^e , $\sigma_{\theta\theta}^e$ и $\sigma_{r\theta}^e$ — возмущения первого порядка малости соответствующих компонент напряжения, отнесенные к σ_{s2} ; u^e — возмущение первого порядка малости радиального смещения, отнесенное к b , а A , B и C — неопределенные коэффициенты. Следовательно, характеристическое уравнение приобретает вид [9]

$$\tilde{\Delta}(\beta_0) = 0, \quad (7)$$

где $\tilde{\Delta}(\beta_0)$ — определитель матрицы $(a_{ij})_{i,j=1}^3$ с

$$a_{11} = 2 + A_1 \frac{\sigma_{s2}}{E_2} \frac{m_2 - 3}{m_2}, \quad a_{12} = 3m_2 + 1, \quad a_{13} = -2 + A_1 \frac{\sigma_{s2}}{E_2} \frac{m_2 + 1}{m_2},$$

$$a_{21} = 2 + A_2 \frac{\sigma_{s2}}{E_2} \frac{m_2 - 3}{m_2}, \quad a_{22} = -(m_2 - 1), \quad a_{23} = -2 + A_2 \frac{\sigma_{s2}}{E_2} \frac{m_2 + 1}{m_2}, \quad a_{31} = 2\beta_0,$$

$$a_{32} = -(m_2 - 1)\beta_0^{-1}, \quad a_{33} = -2\beta_0^{-3}, \quad A_1 = 2C_3 - 6(\nu_2 + 3)x, \quad A_2 = A_1 + 24x.$$

4. Решение в случае D1реD2ре. Здесь анализу подлежит возможный механизм потери устойчивости составного диска D (см. рис. 3) с образованием двух пластических зон (круговой в D1 и кольцевой в D2). Невозмущенное состояние диска D определяется так:

$$\sigma_{\theta\theta} = \begin{cases} s, & \rho \in [0, \beta_{01}], \\ C_1 + \frac{C_2}{\rho^2} - \frac{\sigma_1(3\nu_1 + 1)}{8\sigma_{s2}} \rho^2, & \rho \in [\beta_{01}, \beta), \\ 1, & \rho \in (\beta, \beta_0], \\ C_4 \left(1 + \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}} - \frac{\sigma_2(3\nu_2 + 1)}{8\sigma_{s2}} \rho^2, & \rho \in [\beta_0, 1], \end{cases} \quad (8)$$

$$\sigma_{rr} = \begin{cases} s - \frac{\sigma_1}{3\sigma_{s2}} \rho^2, & \rho \in [0, \beta_{01}], \\ C_1 - \frac{C_2}{\rho^2} - \frac{\sigma_1(\nu_1 + 3)}{8\sigma_{s2}} \rho^2, & \rho \in [\beta_{01}, \beta], \\ 1 - \frac{\sigma_2}{3\sigma_{s2}} \rho^2 + \frac{C_3}{\rho}, & \rho \in [\beta, \beta_0], \\ C_4 \left(1 - \frac{1}{\rho^2}\right) + \frac{\sigma_2(\nu_2 + 3)}{8\sigma_{s2}} (1 - \rho^2), & \rho \in [\beta_0, 1], \end{cases} \quad (9)$$

где

$$\beta_{01} = \frac{r_{01}}{b}, \quad \beta_0 = \frac{r_{02}}{b}, \quad C_1 = s + 2\Gamma(3\nu_1 + 1)\beta_{01}^2 x, \quad C_2 = \Gamma(3\nu_1 + 1)\beta_{01}^4 x,$$

$$C_3 = 2\beta_0 \{ [3(\nu_2 + 3) - (3\nu_2 + 1)(2 - \beta_0^2)\beta_0^2]x - 1 \} \{1 + \beta_0^2\}^{-1},$$

$$C_4 = \{1 - 3(\nu_2 + 3 - (3\nu_2 + 1)\beta_0^2)x\} \{1 + \beta_0^{-2}\}^{-1},$$

$$x = \frac{1 - s(\varepsilon + k)}{\Gamma\{(3\nu_1 + 1)[2(\varepsilon + k) + (\varepsilon - k)\beta^{-2}\beta_{01}^2]\beta_{01}^2 - 3\beta^2[\varepsilon(3\nu_1 + 1) + k(\nu_1 + 3)]\}},$$

$$\beta_{01}^2 = \frac{-c_2 \pm \sqrt{c_2^2 - 4c_1 c_3}}{2c_1},$$

причем

$$c_1 = -\beta^2 \Gamma(3\nu_1 + 1) \{ [1 - 2\varepsilon s + \varepsilon - k](1 + \beta_0^2) - 2(\varepsilon - k)\beta^{-1}\beta_0 \},$$

$$c_2 = 2\Gamma(3\nu_1 + 1) \{ [1 - (\varepsilon + k)](1 + \beta_0^2) + 2(\varepsilon + k)\beta^{-1}\beta_0 \},$$

$$c_3 = 3\beta^2 \Gamma[\varepsilon(3\nu_1 + 1) + k(\nu_1 + 3)] \{ (1 - s)(1 + \beta_0^2) - 2\beta^{-1}\beta_0 \} + [1 - s(\varepsilon + k)] \times \\ \times \{ \beta^2(8 - 3\Gamma(\nu_1 + 3))(1 + \beta_0^2) - 2\beta^{-1}\beta_0 [3(\nu_2 + 3) - (3\nu_2 + 1)(2 - \beta_0^2)\beta_0^2] \}.$$

С учетом этого в характеристическом уравнении (7) нужно переопределить A_1 и A_2 :

$$A_1 = 2C_4 - 6(\nu_2 + 3)x, \quad A_2 = A_1 + 24x.$$

Общий вид элементов a_{ij} , $i, j = 1, \dots, 3$, совпадает с приведенным в пункте 3.

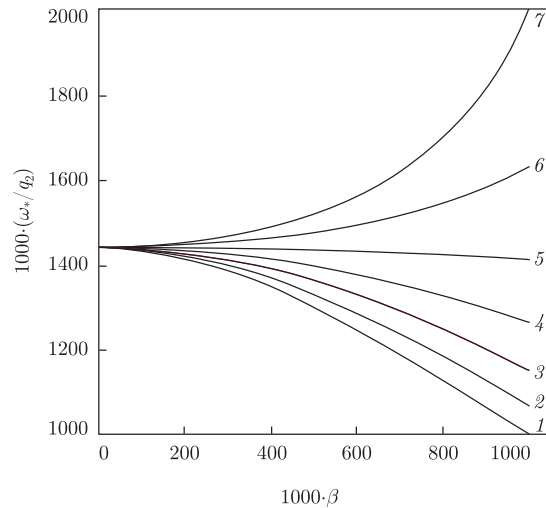


Рис. 4

Решив характеристическое уравнение (7), по найденному критическому значению $\beta_0 = \beta_{0*}$ радиуса кольцевой пластической области D2p определяем согласно (8) и (9) критический радиус $\beta_{01} = \beta_{01*}$ круговой пластической зоны D1p и критическую угловую скорость ω_* .

5. Примеры. Относительная критическая скорость вращения диска с параметрами $\beta = 0,93$, $\nu_1 = 0,31$, $\nu_2 = 0,3$, $\varepsilon = 1$, $\Gamma = 0,99$, $s = 0,99$, $\sigma_{s2}/E_2 = 0,01$, теряющего, по предположению, устойчивость по сценарию (а), равна 1,5533. Для диска с $\beta = 0,1$, $\nu_1 = 0,3$, $\nu_2 = 0,4$, $\varepsilon = 1,1$, $\Gamma = 0,9$, $s = 1,1$, $\sigma_{s2}/E_2 = 0,01$ относительная критическая скорость в этом случае равна 1,6757, а для диска с $\beta = 0,5$, $\nu_1 = 0,3$, $\nu_2 = 0,2$, $\varepsilon = 1,2$, $\Gamma = 0,9$, $s = 1,1$, $\sigma_{s2}/E_2 = 0,01$ — 1,6807. Не меняя в каждом из дисков значения β и полагая при этом $\nu_1 = \nu_2 = 0,5$, $\varepsilon = \Gamma = s = 1$, получаем известное значение [5, 9] “первой критической скорости” $\omega_*/q_2 = 1,5118$ для плоского сплошного однородного диска. Для каждого из трех указанных составных дисков, рассмотренных ранее в связи с анализом самоуравновешенной формы потери устойчивости, не существует решений характеристического уравнения (7) в предположении, что реализуется какой-либо из механизмов (б) или (в) эксцентричной формы неустойчивости.

На рис. 4 представлены графики зависимостей относительной критической скорости от радиуса окружности $\rho = \beta$, отделяющей D1 от D2, для диска D с параметрами $\nu_1 = 0,4$, $\nu_2 = 0,3$, $\varepsilon = 1,2$, $s = 0,85$, $\sigma_{s2}/E_2 = 0,01$ при различных Γ : 1 — $\Gamma = 2$; 2 — $\Gamma = 1,75$; 3 — $\Gamma = 1,5$; 4 — $\Gamma = 1,25$; 5 — $\Gamma = 1$; 6 — $\Gamma = 0,75$; 7 — $\Gamma = 0,5$.

По мере расширения круговой секции D1 за счет сужения кольцевой секции D2 и убывания отношения $\Gamma = \gamma_1/\gamma_2$ от 1 до 0,5 исследуемый составной диск D становится менее массивным и более устойчивым — допустимая постоянная скорость вращения увеличивается с возрастанием β и убыванием Γ (кривые 6, 7). В случае убывания отношения γ_1/γ_2 от 2 до 1 критическая скорость тоже возрастает, убывая, естественно, с увеличением β при каждом фиксированном значении Γ из указанного диапазона (кривые 1–5).

6. Обсуждение результатов. Как видно из пункта 5, предложенным в данной работе способом изучения развития неустойчивости можно рассчитать момент перехода быстро вращающегося составного сплошного кругового диска в неустойчивое состояние по одному

из механизмов (а)–(в). При этом полученный в работе результат в случае (а) обобщает аналогичный результат для сплошного однородного диска [5, 6, 8, 10].

Случаи (б) и (в) интерпретируются как потеря устойчивости однородным кольцевым диском D2, специальным образом нагруженным в его плоскости по внутренней контуре [11]. В связи с этим отсутствие, по крайней мере, в соответствующих примерах из пункта 5 ненулевых корней полученного характеристического уравнения полностью согласуется с упомянутыми в пункте 2 результатами работ [5, 6, 8, 9].

1. *Гузь А. Н., Бабич И. Ю.* Трехмерная теория устойчивости деформируемых тел. – Киев: Наук. думка, 1985. – 280 с.
2. *Надаи А.* Пластичность и разрушение твердых тел: в 2 т. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1954. – Т. 1. – 648 с.
3. *Бицено К. Б., Граммель Р.* Техническая динамика. Т. 1. – Москва; Ленинград: ГИТТЛ, 1950. – 900 с.
4. *Бицено К. Б., Граммель Р.* Техническая динамика. Т. 2. – Москва; Ленинград: ГИТТЛ, 1952. – 640 с.
5. *Ершов Л. В., Ивлев Д. Д.* О потере устойчивости вращающихся дисков // Изв. АН СССР, ОТН. – 1958. – № 1. – С. 124–125.
6. *Ивлев Д. Д.* Механика пластических сред. Т. 2. – Москва: Физматлит, 2002. – 448 с.
7. *Ивлев Д. Д.* О потере несущей способности вращающихся дисков, близких к круговому // Изв. АН СССР, ОТН. – 1957. – № 1. – С. 141–144.
8. *Ивлев Д. Д., Ершов Л. В.* Метод возмущений в теории упруго-пластического тела. – Москва: Наука, 1978. – 208 с.
9. *Лила Д. М.* Эксцентричная форма потери устойчивости вращающегося упруго-пластического диска // Доп. НАН України. – 2011. – № 2. – С. 49–53.
10. *Лила Д. М., Мартынюк А. А.* О потере устойчивости вращающегося упруго-пластического кругового диска // Там само. – 2011. – № 1. – С. 44–51.
11. *Lila D. M., Martyniuk A. A.* Stability loss of rotating elastoplastic discs of the specific form // Appl. Mathematics. – 2011. – 2, No 5. – P. 579–585.
12. *Гузь А. Н., Немчи Ю. Н.* Метод возмущения формы границы в механике сплошных сред. – Киев: Выща шк., 1989. – 352 с.
13. *Соколовский В. В.* Теория пластичности. – Москва: Высш. шк., 1969. – 608 с.

*Институт механики им. С. П. Тимошенко
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 28.12.2011

Д. М. Лила

Ексцентрична форма нестійкості складеного плоского кругового диска, що обертається

Запропоновано спосіб дослідження методом малого параметра можливої втрати стійкості складеного плоского кругового диска, що обертається. Одержано у першому наближенні характеристичне рівняння відносно критичного радіуса пластичної зони. Чисельно знайдено значення критичної кутової швидкості обертання при різних параметрах диска.

D. M. Lila

Eccentric instability form of a rotating composite plane circular disc

A way of calculating the possible stability loss by a rotating elastoplastic composite plane circular disc is suggested within the small-parameter method. A characteristic equation for the critical radius of a plastic zone is obtained as the first approximation. The values of critical angular velocity of rotation for various parameters of the disc are found numerically.

Академик НАН Украины А. А. Мартынюк

О стабилизации движения систем с последствием импульсными возмущениями

Исследуется класс механических систем, описываемых уравнениями с последствием и импульсными возмущениями. С помощью метода Ляпунова–Разумихина и функций Ляпунова, определенных на произведении пространств, установлены достаточные условия устойчивости.

Импульсное возмущение может стабилизировать и/или дестабилизировать движение нелинейной системы с последствием. Цель данной работы — получение условий стабилизации движения системы с последствием на основе двух подходов: путем применения функций Ляпунова–Разумихина и функций Ляпунова на произведении пространств.

Постановка задачи. Рассмотрим систему уравнений возмущенного движения с последствием вида

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x_t), & t \geq t_0, \\ x(\sigma) &= \varphi(\sigma) \in PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n), & \sigma \geq t_0, \end{aligned} \quad (1)$$

где $x \in \mathbb{R}^n$, $x_t \in PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$, $f: \mathbb{R}_+ \times PC \times \rightarrow \mathbb{R}^n$; $PC = PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$ — пространство кусочно-непрерывных справа функций $\varphi: [- \tau, 0] \rightarrow \mathbb{R}^n$; $S(H) = \{x \in \mathbb{R}^n, \|x\| < H\}$.

Пусть $|\varphi| = \sup_{- \tau \leq s \leq 0} \|\varphi(s)\|$, где $\|\cdot\|$ — евклидова норма вектора в \mathbb{R}^n и $x_t(s) = x(t + s)$ при $- \tau \leq s \leq 0$; dx/dt обозначает правую производную вектора состояния системы (1).

Наряду с системой (1) будем рассматривать уравнения возмущенного движения системы при импульсных возмущениях

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(t, x_t, \alpha), & t \neq \tau_k, \\ \Delta x &= I_k(t, x(t^-)), & t = \tau_k, & k \in \mathbb{N}_+, \end{aligned} \quad (2)$$

где $I_k: \mathbb{R}_+ \times S(H) \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\Delta x = x(t) - x(t^-)$; $t_0 < \tau_k < \tau_{k+1}$, $\tau_k \rightarrow +\infty$ при $k \rightarrow +\infty$, $k \in \mathbb{N}_+$; \mathbb{N}_+ — множество всех положительных чисел.

Движение системы с последствием (1) стабилизируемо с помощью импульсных возмущений, если существует последовательность моментов $\{\tau_k\}$, $\tau_k - \tau_{k-1} \neq 0$, и последовательность соответствующих вектор-функций $\{I_k(x)\}$, $k \in \mathbb{N}_+$, таких, что нулевое решение системы (2) обладает определенным типом устойчивости, более сильным, чем устойчивость состояния $x = 0$ системы (1). Например, нулевое решение системы (1) может быть устойчивым, но не асимптотически, в то время как импульсное возмущение упрочняет движение системы (2) до асимптотически или экспоненциально устойчивого.

Наша задача — получить условия стабилизации движения системы (1) при помощи импульсных возмущений.

О классе вспомогательных функций для системы (1). Для системы (1) будем применять функцию

$$V_2(t, x) = \theta^T U(t, *) \theta, \quad \theta \in \mathbb{R}_+^2, \quad (3)$$

где

$$U(t, *) = \begin{pmatrix} v_{11}(t, x_1) & v_{12}(t, x_1, x_2) \\ v_{21}(t, x_1, x_2) & v_{22}(t, x_2) \end{pmatrix}.$$

Здесь $x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$, $x_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$, $n_1 + n_2 = n$, $v_{11}(t, x_1): \mathbb{R}_+ \times S(H_1) \rightarrow \mathbb{R}_+$, $v_{22}(t, x_2): \mathbb{R}_+ \times S(H_2) \rightarrow \mathbb{R}_+$ и $v_{12}(t, x_1, x_2) = v_{21}(t, x_1, x_2): \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}^{n_1} \times \mathbb{R}^{n_2} \rightarrow \mathbb{R}$, $S(H_1) = \{x_1 \in \mathbb{R}^{n_1}: \|x_1\| < H_1\}$, $S(H_2) = \{x_2 \in \mathbb{R}^{n_2}: \|x_2\| < H_2\}$, $H_1, H_2 > 0$.

Заметим, что для некоторых классов систем вида (1) матричная функция $U(t, *)$ может быть построена в явном виде путем решения матричных уравнений Ляпунова и специального уравнения для определения элемента $v_{12}(t, x_1, x_2)$.

Функция (3) удовлетворяет условию B_2 , если:

а) $V_2(t, x)$ непрерывна на любом множестве $[\tau_{k-1}, \tau_k) \times \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ и при всех $x, y \in \mathbb{R}^n$ и $k \in \mathbb{N}_+$ существует предел $\lim_{(t,y) \rightarrow (\tau_k^-, x)} = V_2(\tau_k^-, x)$;

б) $V_2(t, x)$ — локально липшицева по $x \in \mathbb{R}^n$ и $V_2(t, 0) = 0$ при всех $t \geq t_0$.

Теоремы о стабилизации решений системы (1). Имеет место следующее утверждение.

Теорема 1. Пусть для системы (1) построена функция $V_2(t, x)$, удовлетворяющая условию B_2 . Кроме того, существуют постоянные $p, c_1, c_2, \lambda > 0$ и $\beta > \tau$ такие, что

1) $c_1 \|x\|^p \leq V_2(t, x) \leq c_2 \|x\|^p$ при всех $t \geq t_0$ и $x \in \mathbb{R}^n$;

2) вдоль решений системы (1) верна оценка

$$D^+ V_2(t, \varphi(0))|_{(1)} \leq 0$$

при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k)$, $k \in \mathbb{N}_+$, как только $qV_2(t, \varphi(0)) \geq V_2(t + s, \varphi(s))$ при $s \in [-\tau, 0]$, $q \geq e^{2\lambda\beta}$;

3) существуют постоянные $d_k > 0$, $k \in \mathbb{N}_+$, такие, что $V_2(\tau_k, \varphi(0) + I_k(\varphi)) \leq d_k V_2(\tau_k^-, \varphi(0))$;

4) при всех $k \in \mathbb{N}_+$ $\tau \leq \tau_k - \tau_{k-1} \leq \beta$ и $\ln(d_k) + \lambda\beta < -\lambda(\tau_{k+1} - \tau_k)$.

Тогда состояние $x = 0$ системы (1) экспоненциально устойчиво в целом.

Доказательство. Пусть $x(t, \varphi) = x(t, t_0, \varphi)$ — любое решение системы (1) с начальной функцией $x_{t_0} = \varphi$. Оценим $c_2 |\varphi|^p$ так: выберем $m > 0$ при заданном q таким, чтобы

$$c_2 |\varphi|^p < m |\varphi|^p e^{-\lambda(\tau_1 - \tau_0)} \leq qc_2 |\varphi|^p.$$

При выполнении условий теоремы 1 нетрудно показать, что

$$V_2(t, x(t, \varphi)) \leq m |\varphi|^p e^{-\lambda(t-t_0)}$$

при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k)$. Поэтому в силу условия 1 теоремы 1 имеем

$$\|x(t, \varphi)\| \leq m^* |\varphi| e^{-\frac{\lambda}{p}(t-t_0)}$$

при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k)$, $k \in \mathbb{N}_+$, где $m^* \geq \max\{1, (m/c_1)^{1/p}\}$. Этим теорема 1 доказана.

При известных ограничениях на элементы $v_{ij}(t, \cdot)$ матричной функции $U(t, *)$ величины c_1, c_2 вычисляются в явном виде как собственные значения специальных матриц.

Заметим, что условие 2 теоремы 1 для системы с последствием без импульсных возмущений не гарантирует устойчивость состояния $x = 0$. Действие импульсных возмущений стабилизирует движение системы (1).

Далее применим функцию Ляпунова на произведении пространств \mathbb{R}^n и $PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$.

Теорема 2. *Предположим, что для системы (1) построена функция (3) со слагаемыми $V_1(t, \varphi, \eta)$ и $V_2(t, x, \eta)$, удовлетворяющими условиям B_0, B_2 соответственно. Кроме того, существуют постоянные $0 < p_1 < p_2$ и $\beta, \mu, c, c_1, c_2, c_3 > 0, d_k \geq 0$ при $k \in \mathbb{N}_+$ такие, что*

1) $c_1 \|x\|^{p_1} \leq V_2(t, x) \leq c_2 \|x\|^{p_1}, 0 \leq V_1(t, \varphi) \leq c_3 |\varphi|^{p_2}$ при всех $t \in \mathbb{R}_+, x \in \mathbb{R}^n, \varphi \in PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n)$;

2) при любом $k \in \mathbb{N}_+$ и $x \in \mathbb{R}^n$ верна оценка

$$V_2(\tau_k, x + I_k(x)) \leq d_k V_2(\tau_k^-, x);$$

3) для функции $V(t, \psi) = V_1(t, \psi) + V_2(t, \psi(0))$ выполняется оценка

$$D^+V(t, \psi)|_{(1)} \leq cV(t, \psi)$$

при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k), \psi \in PC([- \tau, 0], \mathbb{R}^n), k \in \mathbb{N}_+$;

4) при любых $k \in \mathbb{N}_+ \tau \leq \tau_k - \tau_{k-1} \leq \mu$ и $\ln\left(d_k + \frac{c_3}{c_1} e^{(p_2/p_1 - 1)ck\mu}\right) \leq -(\beta + c)\mu$.

Тогда состояние $x = 0$ системы (1) экспоненциально устойчиво в целом.

Доказательство. Пусть $x(t, \varphi)$ — любое решение системы (1) с начальной функцией $\varphi \in PC(\delta)$. Для заданного значения $\varepsilon \in (0, 1]$ выберем $\delta = \delta(\varepsilon)$ так, чтобы выполнялось неравенство

$$c_2 \delta^{p_1} + c_3 \delta^{p_2} < c_1 \varepsilon^{p_1} e^{-(\beta+c)\mu}. \quad (4)$$

Из условия 3 теоремы 2 следует, что

$$V(t) \leq V(\tau_{k-1}) e^{c(t-\tau_{k-1})} \quad (5)$$

при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k), k \in \mathbb{N}_+$. Применяя оценки (4) и (5) для $k = 1$ и $k = j + 1$, не трудно показать, что при выполнении условий (1)–(4) теоремы 2 верна оценка $V(t) < c_1 \varepsilon^{p_1} e^{-(\beta+c)k\mu} e^{c(t-t_0)}$ и при всех $t \in [\tau_{k-1}, \tau_k), k \in \mathbb{N}_+, \|x(t, \varphi)\| < \varepsilon e^{-(\beta/p_1)(t-t_0)}$. Этим теорема 2 доказана.

Заметим, что условие 3 теоремы 2 допускает, что $D^+V(t, \varphi)|_{(1)} > 0$ при $t \neq \tau_k, k \in \mathbb{N}_+$, при $\psi(0) \neq 0$. Это означает, что непрерывная компонента системы (1) может быть неустойчивой. С другой стороны, условие 4 устанавливает связь между частотой импульсов и ростом функции $V(t, \psi)$, при которых импульсные возмущения стабилизируют движение системы (1) к экспоненциально устойчивому в целом.

Пример. Рассмотрим систему с последствием второго порядка (см. [3])

$$\frac{d^2x}{dt^2} + b(t) \frac{dx}{dt} + a(t)x(t - \tau) = 0, \quad t \geq t_0,$$

$$x(t) = \varphi(t),$$

$$\frac{dx}{dt} = \psi(t), \quad t_0 - \tau \leq t \leq t_0,$$

и соответствующую ей систему с импульсным возмущением

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + b(t) \frac{dx}{dt} + a(t)x(t - \tau) = 0, \quad t \neq \tau_k,$$

$$x(\tau_k) = I_k(x(\tau_k^-)),$$

$$\frac{dx}{dt}(\tau_k) = J_k\left(\frac{dx}{dt}(\tau_k^-)\right),$$

$$x(t) = \varphi(t),$$

$$\frac{dx}{dt} = \psi(t), \quad t_0 - \tau \leq t \leq t_0,$$

где $t_0 < \tau_1 < \dots < \tau_k < \dots$, $k \in \mathbb{N}_+$, $\lim \tau_k = +\infty$ при $k \rightarrow \infty$, I_k, J_k, φ и $\psi \in C(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ и $I_k(0) = J_k(0) = 0$ при $k \in \mathbb{N}_+$.

Пусть параметры $a(t), b(t) \in C([t_0, \infty), \mathbb{R})$ и существуют постоянные \bar{a}, \bar{b} такие, что $|a(t)| \leq \bar{a}, |b(t)| \leq \bar{b}$ при всех $t \in [t_0, \infty)$, $\bar{a}, \bar{b} > 0$. Пусть импульсные возмущения происходят в моменты $\{\tau_k\}$ такие, что $\theta_1 \leq \tau_k - \tau_{k-1} \leq \theta_2$, где $\theta_1, \theta_2 > 0, \theta_2 < +\infty$.

Рассмотрим последовательность функций $\{I_k(u) = J_k(u)\}$, где $I_k(u) = (d_k/2)^{1/2}u$ при всех $k \in \mathbb{N}_+$. Если существует постоянная $\alpha > 0$ такая, что

$$\ln(d_k + \bar{a}\theta_1) < -(\alpha + 1 + \bar{a} + 2\bar{b})\theta_2,$$

где $\theta_1 = \tau, \theta_2 < +\infty$, то движение системы с последствием стабилизируемо импульсными возмущениями до экспоненциальной устойчивости в целом.

1. Мартынюк А. А., Мартынюк-Черниенко Ю. А. О робастной устойчивости систем с последствием // Доп. НАН України. – 2012. – № 8. – С. 47–53.
2. Yan J., Shen J. Impulsive stabilization of functional differential equations by Lyapunov–Razumikhin functions // Nonlinear Analysis. – 1999. – 37. – P. 245–255.
3. Wang Q. Stability and boundedness of impulsive systems with time delay. – Waterloo: Univ. of Waterloo, 2007. – 204 p.

Інститут механіки ім. С. П. Тимошенка
НАН України, Київ

Поступило в редакцію 28.12.2011

Академік НАН України **А. А. Мартинюк**

Про стабілізацію руху систем з післядією імпульсними збуреннями

Досліджується клас механічних систем, що описуються рівняннями з післядією та імпульсними збуреннями. За допомогою методу функцій Ляпунова–Разуміхіна та функцій Ляпунова, означених на добутку просторів, встановлено достатні умови стійкості.

Academician of the NAS of Ukraine **A. A. Martynyuk**

On the stabilization of a motion of systems with delay by impulses

We investigate a class of mechanical systems, which are described by the equations with delay and impulsive perturbation. By using the method of Lyapunov–Razumikhin and Lyapunov functions defined on a product of spaces, the sufficient stability criteria are established.



УДК 537.8:537.9

© 2012

Ю. О. Аверков

Влияние дефектного слоя на границе фотонного кристалла и плазмоподобной среды на свойства поверхностных электромагнитных состояний

(Представлено академиком НАН Украины В. М. Яковенко)

Исследовано влияние параметров дефектного слоя на границе плазмоподобной среды и фотонного кристалла на свойства поверхностных электромагнитных состояний. Показано, что наличие дефектного слоя приводит к возникновению новых состояний, уменьшению частоты ранее существовавших состояний и способствует увеличению степени локализации их электромагнитного поля на границе раздела сред.

В последнее время большое внимание уделяется исследованию свойств поверхностных электромагнитных состояний (ПЭС), теоретически предсказанных и экспериментально обнаруженных в работах [1–3]. Такие состояния представляют собой однородные вдоль поверхности электромагнитные колебания, не переносящие энергию [2]. ПЭС могут существовать как на границе однородной среды и фотонного кристалла (ФК), так и на границе двух ФК. В первом случае однородная среда должна обладать отрицательной диэлектрической (или магнитной) проницаемостью. Спадание электромагнитного поля по направлению внутрь ФК связано с существованием запрещенных зон. ПЭС представляют интерес не только с теоретической, но и с практической точки зрения. Например, такие состояния и структуры, в которых они реализуются, могут быть использованы для создания резонансных оптических фильтров [3], поляритонных лазеров [4] и устройств оптической логики [5]. Важно отметить, что ПЭС являются прямым электромагнитным аналогом предсказанных И. Е. Таммом в 1932 г. поверхностных электронных состояний [6]. Это еще раз подчеркивает фундаментальную физическую природу ПЭС и указывает на необходимость их дальнейшего исследования.

Целью настоящей работы является теоретическое исследование влияния параметров дефектного слоя на границе ФК и плазмоподобной среды (ПС) на свойства ПЭС. ФК представляет собой периодическую последовательность диэлектрических и плазмоподоб-

ных слоев. Предполагается, что толщина диэлектрических слоев ФК намного превышает толщину его плазмopodobных слоев, а также толщину дефектного слоя. Это позволяет рассматривать плазмopodobные слои ФК и дефектный слой в качестве электромагнитного аналога δ -образных потенциальных барьеров (потенциальных ям) в задаче об электронных поверхностных состояниях и применить подход Кронига-Пенни для вывода уравнений, описывающих ПЭС.

Постановка задачи и основные уравнения. Пусть область $y < 0$ занимает ПС с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_p(\omega)$, область $y > 0$ занимает ФК, состоящий из диэлектрических слоев с проницаемостью ε_d и плазмopodobных слоев с проницаемостью $\varepsilon_b(\omega)$. Пусть также на границе $y = 0$ находится тонкий дефектный плазмopodobный слой с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon_\ell(\omega)$. Запишем зависимость диэлектрической проницаемости исследуемой структуры от координаты y следующим образом:

$$\varepsilon(y) = \begin{cases} \varepsilon_p(\omega) & \text{при } y < 0, \\ \varepsilon_\ell(\omega)a\delta(y) & \text{при } y = 0, \\ \varepsilon_d & \text{при } (N-1)d < y < Nd, \\ \varepsilon_b(\omega)b\delta(y - Nd) & \text{при } y = Nd, \end{cases} \quad (1)$$

где $N = 1, 2, \dots$, $\delta(y)$ — дельта-функция Дирака; $\varepsilon_j(\omega) = \varepsilon_{0j}(1 - \omega_j^2/\omega^2)$; $\omega_j = \sqrt{4\pi e^2 n_j / (\varepsilon_{0j} m_j)}$ — плазменная частота; ε_{0j} — диэлектрическая постоянная решетки; n_j и m_j — концентрация и эффективная масса электронов соответственно, $j = p, \ell, b$.

Рассмотрим электромагнитную волну с компонентами полей $(E_x, 0, 0)$ и $(0, 0, H_z)$, распространяющуюся вдоль оси y . В ПС ($y < 0$) выражения для компонент E_x и H_z имеют следующий вид:

$$E_{px} = F \exp(\kappa_p y), \quad H_{pz} = \frac{ic\kappa_p}{\omega} F \exp(\kappa_p y), \quad (2)$$

где $\kappa_p = \omega \sqrt{-\varepsilon_p(\omega)}/c$, $\varepsilon_p(\omega) < 0$. В области ФК в интервале $0 < y < d$ выражения для компонент полей запишем в виде

$$E_{1x} = A \exp(ik_d y) + B \exp(-ik_d y), \quad H_{1z} = -\frac{ck_d}{\omega} [A \exp(ik_d y) - B \exp(-ik_d y)], \quad (3)$$

где $k_d = \omega \sqrt{\varepsilon_d}/c$. В интервале $d < y < 2d$ выражения для компонент полей запишутся аналогичным образом:

$$E_{2x} = C \exp(ik_d y) + D \exp(-ik_d y), \quad H_{2z} = -\frac{ck_d}{\omega} [C \exp(ik_d y) - D \exp(-ik_d y)]. \quad (4)$$

Для того чтобы получить уравнения, позволяющие определить значения частот ПЭС, необходимо удовлетворить следующим граничным условиям:

$$E_{px}(0) = E_{1x}(0), \quad (5)$$

$$H_{1z}(0) - H_{pz}(0) = -\frac{i\omega}{c} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\eta}^{+\eta} \varepsilon(y) E_x(y) dy, \quad (6)$$

$$E_{1x}(d) = E_{2x}(d), \quad (7)$$

$$H_{2z}(d) - H_{1z}(d) = -\frac{i\omega}{c} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{d-\eta}^{d+\eta} \varepsilon(y) E_x(y) dy, \quad (8)$$

$$E_{1x}(0) \exp(iqd) = E_{2x}(d), \quad (9)$$

$$H_{1z}(0) \exp(iqd) = H_{2z}(d). \quad (10)$$

Здесь условия (9), (10) описывают свойства периодичности тангенциальных компонент электрического и магнитного полей в ФК, а величина q является постоянной распространения электромагнитной волны в ФК. Граничные условия (5)–(10) представляют собой электромагнитный аналог квантово-механических граничных условий, налагаемых на волновую функцию электрона в решетке в рамках модели Кронига-Пенни [7, 8]. Подставив (3), (4) в условия непрерывности (7), (8) и условия периодичности (9), (10), получим электромагнитный аналог уравнения Кронига-Пенни:

$$\cos \psi_q = \cos \psi + p\psi \sin \psi, \quad (11)$$

где $\psi_q = qd$, $\psi = k_d d$, $p = -b\varepsilon_b(\omega)/(2d\varepsilon_d)$. Заметим, что при $\varepsilon_b(\omega) < 0$ плазмopodobные слои ФК непрозрачны для электромагнитной волны и являются аналогом потенциальных барьеров решетки в квантово-механической задаче, а при $\varepsilon_b(\omega) > 0$ — аналогом потенциальных ям. Подставив (3), (4) в условия непрерывности (5), (6), получим уравнение, связывающее частоту ПЭС с постоянной распространения q , а также с параметрами ПС, дефектного слоя и диэлектрических слоев ФК:

$$\exp(i\psi_q) = \cos \psi + \left(\frac{\kappa_p}{k_d} - g\psi \right) \sin \psi, \quad (12)$$

где $g = \varepsilon_\ell(\omega)a/(\varepsilon_d d)$. При $\varepsilon_\ell(\omega) < 0$ дефектный слой непрозрачен для электромагнитной волны и играет роль потенциального барьера в квантово-механической задаче, а при $\varepsilon_\ell(\omega) > 0$ — роль потенциальной ямы.

Из выражения (11) получаем следующие решения для комплексной фазы ψ_q , соответствующие запрещенным зонам бесконечного ФК:

$$\psi_q = \begin{cases} 2n\pi + i \ln(S + \sqrt{S^2 - 1}) & \text{при } S > 1, \\ (2n + 1)\pi + i \ln(|S| + \sqrt{S^2 - 1}) & \text{при } S < -1, \end{cases} \quad (13)$$

где $S = \cos \psi + p\psi \sin \psi$, $n = 0, 1, 2, \dots$. В силу выбранной геометрии задачи убывающим от границы $y = 0$ в глубь ФК решениям соответствуют значения $\text{Im}(\psi_q) > 0$. Воспользовавшись выражениями (13), перепишем исследуемую систему уравнений в следующем виде:

$$\alpha \cosh \mu = \cos \psi + p\psi \sin \psi, \quad (14)$$

$$\alpha \sinh \mu = -[\kappa_p d - (p + g)\psi^2] \frac{\sin \psi}{\psi}, \quad (15)$$

где $\alpha = \pm 1$, $\mu = \text{Im}(\psi_q)$. Значение $\alpha = 1$ соответствует запрещенным зонам, где $S > 1$, а значение $\alpha = -1$ — запрещенным зонам, где $S < -1$. Очевидно, что ПЭС могут существовать в запрещенных зонах ФК при значениях ψ_q и ψ , удовлетворяющих уравнениям (14) и (15).

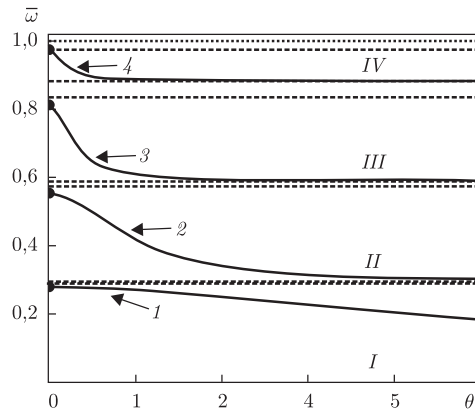


Рис. 1. Зависимости $\bar{\omega}(\theta_1)$ (кривые 1–4) при наличии дефектного диэлектрического слоя на границе раздела сред. Темные кружки обозначают точки начала соответствующих зависимостей. Штриховые линии соответствуют границам запрещенных зон I–IV

Обсуждение результатов. Рассмотрим вначале случай, когда дефектный слой на границе раздела сред представляет собой диэлектрик толщиной a с проницаемостью $\varepsilon_{0\ell}$. В дальнейшем удобно ввести следующие безразмерные величины:

$$\bar{\omega} = \frac{\omega}{\omega_p}, \quad \bar{\omega}_b = \frac{\omega_b}{\omega_p}, \quad \bar{\omega}_l = \frac{\omega_l}{\omega_p}, \quad (16)$$

$$\bar{d} = d \frac{\omega_p}{c}, \quad \theta_0 = \frac{b\varepsilon_{0b}}{d\varepsilon_d}, \quad \theta_1 = \frac{a\varepsilon_{0\ell}}{d\varepsilon_d}. \quad (17)$$

На рис. 1 приведены зависимости $\bar{\omega}(\theta_1)$ (кривые 1–4) при заданных значениях $\varepsilon_{0p} = 16,8$, $\varepsilon_d = 4,56$, $\bar{d} = 5$, $\bar{\omega}_b = 1$, $\theta_0 = 5$. Сплошные кружки обозначают точки начала соответствующих зависимостей. В этих точках $\mu > 0$ и электромагнитные состояния локализованы как в ПС, так и в ФК. Штриховые линии соответствуют границам запрещенных зон, а цифрами I–IV обозначены номера запрещенных зон. Заметим, что разрешенная зона, расположенная между запрещенными зонами I и II, является достаточно узкой и поэтому практически не видна на рис. 1. В каждой запрещенной зоне зависимость $\bar{\omega}(\theta_1)$ начинается при $\theta_1 = 0$ вблизи одной из границ запрещенной зоны и с ростом параметра θ_1 смещается в сторону противоположной границы. При этом частоты соответствующих ПЭС уменьшаются, а степень локализации поля ПЭС вблизи границы становится наибольшей (т. е. значение μ достигает максимума) при $\bar{\omega}$ и θ_1 , соответствующих центрам запрещенных зон. Следовательно, наличие дефектного диэлектрического слоя на границе ПС и ФК способствует увеличению степени локализации поля ПЭС вблизи границы и приводит к уменьшению частоты ПЭС.

На рис. 2 приведены зависимости $\bar{\omega}(\theta_1)$ в отсутствие дефектного слоя (кривые 1, 3, 4) и при наличии диэлектрического дефектного слоя (кривые 1'–5') при заданных значениях $\varepsilon_{0p} = 16,8$, $\varepsilon_d = 4,56$, $\bar{d} = 5$, $\bar{\omega}_b = 0,4$, $\theta_1 = 1,2$. Светлые кружки обозначают точки окончания соответствующих зависимостей. В этих точках $\mu = 0$ и электромагнитные поля ПЭС становятся полностью делокализованными в области ФК, оставаясь локализованными в ПС. Заметим, что делокализация электромагнитного поля ПЭС в области ФК фактически означает исчезновение самого ПЭС. Из рис. 2 видно, что внедрение диэлектрического слоя на границу ПС–ФК привело к появлению дополнительных ПЭС (кривые 2' и 5') и уменьше-

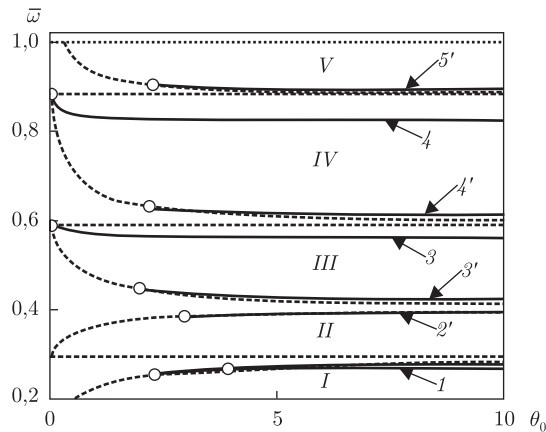


Рис. 2. Зависимости $\bar{\omega}(\theta_0)$ в отсутствие дефектного слоя (кривые 1, 3, 4) и при наличии диэлектрического дефектного слоя (кривые 1'–5'). Светлые кружки обозначают точки окончания соответствующих зависимостей. Штриховые линии соответствуют границам запрещенных зон I–V

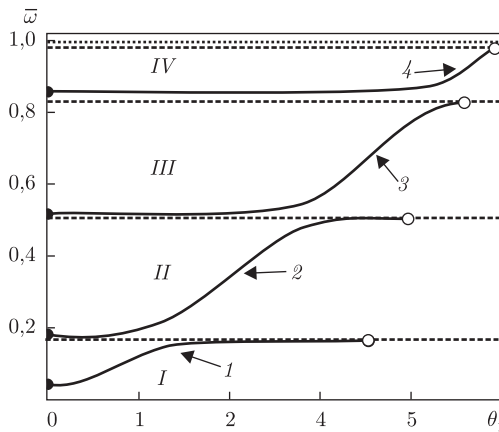


Рис. 3. Зависимости $\bar{\omega}(\bar{\omega}_\ell)$ (кривые 1–4) при наличии дефектного плазменного слоя на границе раздела сред. Темные кружки обозначают точки начала, а светлые кружки — точки окончания соответствующих зависимостей. Штриховые линии соответствуют границам запрещенных зон I–IV

нию частот существовавших ранее ПЭС (кривые 1, 3, 4 трансформировались в кривые 1', 3', 4').

Пусть на границе раздела ПС и ФК находится дефектный плазмоподобный слой с заданным значением диэлектрической постоянной решетки кристалла, а его плазменная частота может изменяться в пределах $0 \leq \bar{\omega}_\ell \leq 1$. На рис. 3 приведены зависимости частот ПЭС от $\bar{\omega}_\ell$ при заданных значениях $\varepsilon_{0p} = 16,8$, $\varepsilon_d = 4,56$, $\bar{d} = 5$, $\bar{\omega}_b = 1$, $\theta_0 = 5$ и $\theta_1 = 5$. Точки начала кривых 1–4 соответствуют случаю, когда на границе раздела сред находится дефектный диэлектрический слой. В этих точках ПЭС локализованы в области ФК. Из рис. 3 видно, что с ростом частоты $\bar{\omega}_\ell$ кривые проходят через центры соответствующих запрещенных зон и заканчиваются на противоположных границах этих зон. Это означает, что существует некоторая оптимальная плазменная частота дефектного слоя, при которой локализация поля ПЭС вблизи границы будет наибольшей. Кроме того, при превышении частотой $\bar{\omega}_\ell$ некоторых критических значений ПЭС становятся делокализованными в области ФК. Каждой запрещенной зоне соответствует свое критическое значение $\bar{\omega}_\ell$.

Таким образом, в настоящей работе показано, что наличие дефектного слоя на границе ПС и ФК приводит к возникновению дополнительных ПЭС, уменьшению частот ранее существовавших ПЭС, а также способствует увеличению степени локализации поля ПЭС вблизи границы раздела сред. В случае, когда дефектный слой является плазмopodobным, существует некоторая оптимальная плазменная частота этого слоя, при которой можно добиться наибольшей степени локализации поля ПЭС. Показано, что ПЭС становятся де-локализованными в области ФК при превышении плазменной частотой дефектного слоя некоторых критических значений.

1. Vinogradov A. P., Dorofeenko A. V. et al. Surface state peculiarities in one-dimensional photonic crystal interfaces // Phys. Rev. B. – 2006. – **74**, No 4. – P. 045128.
2. Виноградов А. П., Дорофеенко А. В., Мерзлякин А. М., Лисянский А. А. Поверхностные состояния в фотонных кристаллах // Усп. физ. наук. – 2010. – **180**, № 3. – С. 249–263.
3. Sasin M. E., Seisyan R. P., Kaliteevski M. A. et al. Tamm plasmon-polaritons: first experimental observation // Superlattices and Microstructures. – 2010. – **47**. – P. 44–49.
4. Kavokin A., Shelykh I., Malpuech G. Optical Tamm states for the fabrication of polariton lasers // Appl. Phys. Lett. – 2005. – **87**, No 26. – P. 261105.
5. Иорш И., Паничева П. В., Словинский В. А., Калитеевский М. А. Связанные таммовские плазмоны // Письма в ЖТФ. – 2012. – **38**, № 7. – С. 104–110.
6. Тамм И. Е. Собр. научн. тр. Т. 1. – Москва: Наука, 1975. – 443 с.
7. Аверков Ю. О., Яковенко В. М. Влияние δ -образной квантовой ямы на границе одномерной решетки на свойства поверхностных электронных состояний таммовского типа // Физика тв. тела. – 2012. – **54**, № 3. – С. 588–593.
8. Соколов А. А., Тернов И. М., Жуковский В. Ч. Квантовая механика. – Москва: Наука, 1979. – 528 с.

Институт радиофизики и электроники
им. А. Я. Усикова НАН Украины, Харьков

Поступило в редакцию 24.01.2012

Ю. О. Аверков

Вплив дефектного шару на межі фотонного кристала і плазмopodobного середовища на властивості поверхневих електромагнітних станів

Теоретично досліджено вплив параметрів дефектного шару на межі плазмopodobного середовища і фотонного кристала на властивості поверхневих електромагнітних станів. Показано, що наявність дефектного шару призводить до виникнення нових станів, зменшення частоти раніше існуючих станів та сприяє збільшенню ступеня локалізації електромагнітного поля цих станів поблизу межі розділу середовищ.

Yu. O. Averkov

Influence of a defective layer at the interface between a photonic crystal and a plasma-like medium on properties of surface electromagnetic states

The influence of parameters of a defective layer at the interface between a photonic crystal and a plasma-like medium on properties of surface electromagnetic states is theoretically analyzed. It is shown that the presence of the defective layer causes the appearance of new states, a decrease of the frequencies of previously existed states, and favors the increasing of the localization of their electromagnetic field near the interface.



УДК 532.517.2:536.255:621.314.2

© 2012

П. Г. Круковский, В. А. Яцевский

Гидродинамические особенности течения и теплообмена во взаимосвязанных каналах силовых масляных трансформаторов

(Представлено академиком НАН Украины А. А. Долинским)

С помощью численного моделирования исследованы тепловые и гидродинамические процессы в системе большого количества взаимосвязанных каналов силовых масляных трансформаторов, что позволило обнаружить эффекты самоорганизации гидродинамических процессов с образованием однонаправленного течения по группам каналов. Эти особенности течения существенным образом влияют на тепловое состояние рассматриваемого оборудования.

Важнейшим фактором обеспечения высокой степени надежности и долговечности силового трансформаторного оборудования является достаточно эффективный отвод части энергии, неизбежно выделяющейся в процессе его работы в виде теплоты в основных элементах конструкции, — в магнитной системе (МС), в обмотках и других деталях активной части (рис. 1). При этом одними из наиболее важных технических параметров, определяющих надежность функционирования и ресурс традиционного силового трансформаторного оборудования, являются уровни температуры наиболее нагретых точек (ННТ) обмоток, превышение которых (более 98 °С) приводит к термической деструкции витковой изоляции. Расположение и значения температур ННТ предсказать достаточно трудно из-за сложной схемы циркуляции масла в многочисленных взаимосвязанных вертикальных и горизонтальных каналах внутри маслonaполненного бака. В связи с этим в энергетике в настоящее время достаточно широко внедряются системы мониторинга и регулирования теплового состояния трансформаторного оборудования в режиме реального времени с помощью опико-волоконных датчиков температуры, которые необходимо устанавливать в этих наиболее нагретых точках.

Применению современного подхода к обоснованному расположению таких датчиков и выявлению особенностей, присущих теплогидравлическим процессам в рассматриваемых системах, и посвящена данная работа. Из-за сложности, дороговизны и продолжительности экспериментальных исследований для решения описанных проблем в последнее время все чаще применяют методы так называемого CFD (Computational Fluid Dynamic) компьютер-

ного моделирования взаимосвязанных теплогидравлических процессов [1–3] в трансформаторном оборудовании, поскольку традиционные инженерные методы не обеспечивают необходимой точности таких расчетов. Конструкция современных высоковольтных мощных силовых трансформаторов (см. рис. 1) достаточно сложная [1–3] и состоит из большого количества неоднородных по теплофизическим характеристикам деталей сложной геометрии (до 100 отдельных узлов). Но все же основная часть конструктивных элементов имеет цилиндрическую симметрию относительно оси стержня каждой фазы трансформатора. Поэтому в настоящей работе анализ теплогидравлических процессов в каналах обмоток выполняется в двухмерной осесимметричной постановке при естественной системе конвективного охлаждения, которая является наиболее сложной для расчетного анализа положения ННТ. В мощных силовых трансформаторах применяют конструкции обмоток, в которых отдельные катушки разделены горизонтальными каналами, количество которых доходит до 400 (см. рис. 1).

В свою очередь, обмотки между собой разделены элементами маслосборной изоляции, которые образуют подсистему вертикальных каналов. Размеры как вертикальных, так и горизонтальных каналов находятся, как правило, в диапазоне 3...12 мм. Для таких трансформаторов теплоотвод через стенки маслосборного бака не может обеспечить приемлемый уровень температур, поэтому к баку присоединяют систему внешнего охлаждения масла, которая может функционировать как в режиме естественной, так и смешанной (естественной плюс вынужденной) конвекции. При этом охлажденное масло от внешних радиаторов поступает в нижнюю часть бака, подымается за счет силы Архимеда (а также, при необходимости, и насосов) по вертикальным и горизонтальным каналам в обмотках и вокруг них, формируя, таким образом, допустимое температурное поле конструктивных элементов оборудования (см. рис. 1 и рис. 3).

Физическая и математическая модели процессов гидродинамики и теплообмена принимались следующими. Предполагалось, что в направлении оси φ цилиндрической системы координат (r, z, φ) зависимые переменные (поля температур, скоростей, давлений) не изменяются. Таким образом, в осесимметричной постановке некоторые специфические особенности обмоток реальных трансформаторов, такие как наличие дистанцирующих прокладок и прошивающих их реек, строго и корректно учесть невозможно. Но, как показали специальные расчеты на трехмерных методических тестовых моделях, влияние этих отдельных конструктивных деталей на тепловое состояние обмоток незначительное.

Математическая модель взаимосвязанных процессов гидродинамики и теплообмена в рассматриваемой системе состоит из полных уравнений Навье–Стокса (сохранения импульса) для вязкой несжимаемой жидкости, сохранения массы (уравнения неразрывности) и уравнения сохранения энергии

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial V_r}{\partial \tau} + V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) &= \\ &= -\frac{\partial P}{\partial r} + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \frac{\partial V_r}{\partial r} \right) + \frac{2\mu}{r} \left(\frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{V_r}{r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \left(\frac{\partial V_r}{\partial z} + \frac{\partial V_z}{\partial r} \right) \right); \\ \rho \left(\frac{\partial V_z}{\partial \tau} + V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} \right) &= \\ &= \rho g - \frac{\partial P}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial r} \left(\mu \left(\frac{\partial V_z}{\partial r} + \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) \right) + \frac{\mu}{r} \left(\frac{\partial V_z}{\partial r} + \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu \frac{\partial V_z}{\partial z} \right); \end{aligned} \quad (1)$$

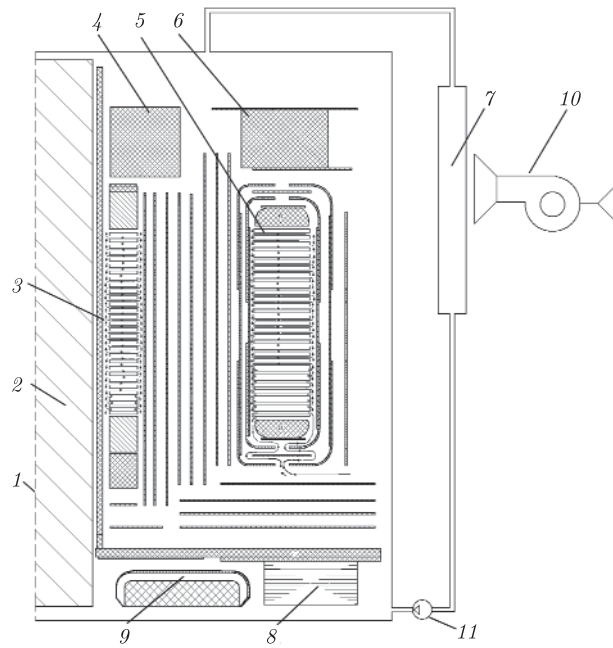


Рис. 1. Схема силового трансформатора мощностью 210 МВ·А: 1 — ось симметрии; 2 — стержень магнитной системы; 3 — обмотка низшего напряжения (НН); 4 — прессующее кольцо над обмоткой НН; 5 — обмотка высшего напряжения (ВН); 6 — прессующее кольцо над обмоткой ВН; 7 — радиатор подсистемы внешнего охлаждения; 8 — шунт под обмоткой ВН; 9 — шунт под обмоткой НН; 10 — вентилятор; 11 — масляный насос

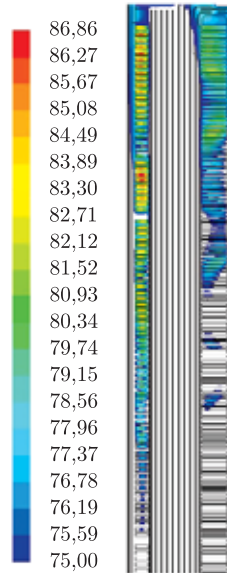


Рис. 3. Поле температур ($^{\circ}\text{C}$) в интервале 75,0–86,86 $^{\circ}\text{C}$ в области обмоток НН и ВН

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial\tau} + \frac{\partial(\rho V_r)}{\partial r} + \frac{\rho V_r}{r} + \frac{\partial(\rho V_z)}{\partial z} = 0; \quad (2)$$

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial \tau} + V_r \frac{\partial T}{\partial r} + V_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\lambda r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial z} \right) + Q_v(r, z). \quad (3)$$

Здесь V_r , V_z — компоненты вектора скорости по направлениям радиальной r и осевой z координат; P — скалярное поле давления; ρ — плотность; C_p — теплоемкость; μ — коэффициент динамической вязкости охлаждающей жидкости; g — ускорение силы тяжести; τ — время. Переносные и термодинамические характеристики охлаждающей жидкости в работе являлись функциями температуры в соответствии с экспериментальными данными, приведенными в работе [4].

Исходными данными к тепловому расчету, кроме общих детальных геометрических параметров конструкции, являются также температура окружающей среды, детальные данные по тепловым нагрузкам (тепловыделениям) отдельных катушек обмоток, а для каждой из обмоток размеры вертикальных и межкатушечных горизонтальных каналов, толщина изоляционных цилиндров и коэффициенты их теплопроводности, параметры внешней системы охлаждения для каждого вида нагрузки.

В области катушек обмоток, металлических элементов МС и стенок бака источники тепловыделения Q_v задавались по результатам предварительного электродинамического расчета. В охлаждающей жидкости (трансформаторном масле) внутри бака $Q_v = 0$, а в области теплосбрасывающей части модели внешнего контура (охлаждающие радиаторы, рис. 1) задавалась отрицательная мощность источников (таким образом моделировался сброс теплоты во внешнюю среду)

$$Q_v = -k \Delta t_{\text{МС}}^{1,2}. \quad (4)$$

Эмпирический коэффициент k и показатель степени при перепаде средней температуры масла в радиаторах над температурой окружающей среды $\Delta t_{\text{МС}}$ в уравнении (4) определялись из экспериментальных данных.

В качестве начальных условий компоненты вектора скорости охлаждающей жидкости задавались равными нулю, а температура всех элементов системы равнялась температуре окружающей среды.

На всех твердых поверхностях, контактирующих с маслом, заданы условия прилипания и непротекания, т. е. равенство нулю компонентов скорости. Уравнение энергии (3) справедливо для описания температурных полей как для жидкого охлаждающего масла, так и твердотельных деталей конструкции, для которых компоненты векторной функции скорости приравниваются нулю. При этом на границе раздела между охлаждающей жидкостью и твердотельными деталями задаются условия сопряжения, т. е. равенство температур и тепловых потоков.

На внешней поверхности маслонаполненного бака заданы смешанные условия конвективного теплообмена с внешней средой (коэффициент теплоотдачи и температура внешней среды) и лучистого теплообмена.

Система уравнений (1)–(4) решалась с помощью неявного конечнообъемного метода в программной среде ANSYS FLUENT. В компьютерной модели двухфазного силового трансформатора мощностью 210 МВ · А рассматривалась только одна фаза, состоящая из двух концентрических обмоток. В обмотке низшего напряжения было 114 катушек, разделенных горизонтальными каналами разной высоты, а обмотка высшего напряжения

состояла из 156 катушек. Расчетная область включала как бак с охлаждающей жидкостью и основными конструктивными элементами в нем, так и внешний контур охлаждения (см. рис. 1). Расчеты проводились для тепловыделений в катушках обмоток и других проводящих деталях, характерных для номинального режима функционирования рассматриваемого оборудования. Расчеты производились на четырехпроцессорном компьютере при использовании распараллеливания с помощью декомпозиции области решения.

Известно, что при конвективном теплообмене как интегральные, так и локальные характеристики теплообмена определяющим образом зависят от характера и структуры течения жидкости. Картина температурных и гидродинамических полей меняется в зависимости от режима охлаждения трансформаторного оборудования и в течение нестационарного процесса. При этом на разных этапах нестационарного процесса наблюдаются существенные как количественные, так и качественные отличия. Направление циркуляции в отдельных каналах на протяжении нестационарного процесса может неоднократно изменяться на противоположное, что было обнаружено с помощью численного моделирования.

Численное решение задачи в сопряженной постановке относительно полей температур, давлений и скоростей дает весьма сложную структуру течения не только в каналах охлаждения, но и внутри маслonaполненного бака трансформатора. Основной особенностью конвективных течений при термической гравитационной конвекции в распределенной взаимосвязанной системе большого количества каналов внутри маслonaполненного бака является одновременное присутствие локальных зон с различной картиной течения. Детальный характер и картина течения, его интенсивность определяются всей совокупностью конструктивных и режимных параметров, иными словами, картина течения определяется процессом нелинейного взаимодействия скалярных полей давлений, температур и векторного поля скоростей. Дополнительным осложняющим фактором является наличие достаточно сложной многосвязной геометрии области решения (см. рис. 1), т. е. заполненного маслом пространства внутри бака, в котором происходит циркуляция масла.

При численном моделировании была обнаружена сложная структура течения в каналах охлаждения (см. рис. 2). На рис. 2, *а* приведена качественная схема, объясняющая особенности течения в рассматриваемом случае, на рис. 2, *б* — распределение перепада полного давления посредине обмотки высшего напряжения (ВН), а на рис. 2, *в* — распределение радиальной компоненты вектора скорости обмотки ВН в зависимости от безразмерной высоты обмотки. Как видно из результатов расчета, по высоте обмотки образовалось 11 групп каналов (приблизительно по 14–15 каналов в группе), в которых характер течения охлаждающей жидкости (масла) имеет преимущественно одинаковое направление — от оси симметрии трансформатора на периферию обмотки в сторону боковой стенки бака или в противоположном направлении. Между отдельными группами каналов имеются каналы, в которых радиальная компонента вектора скорости существенно меньше, чем в центральных каналах группы (застойные зоны). С учетом весьма значительной высоты реальной обмотки (около 3 м) на рис. 2, *г* в увеличенном масштабе представлен отдельный фрагмент этого распределения радиальной компоненты векторного поля скоростей в выбранном диапазоне по высоте (четвертая группа каналов при отсчете снизу обмотки). Преимущественное течение охлаждающей жидкости из внешнего вертикального охлаждающего канала к внутреннему (даже при одинаковой их ширине) ранее качественно наблюдали в натурном эксперименте на специальных физических моделях А. Б. Швидлер и др. [5], что подтверждает возможность реализации описываемого нами характера течения масла в каналах, полученного уже в вычислительном эксперименте. Эти результаты позволяют на основании полученных де-

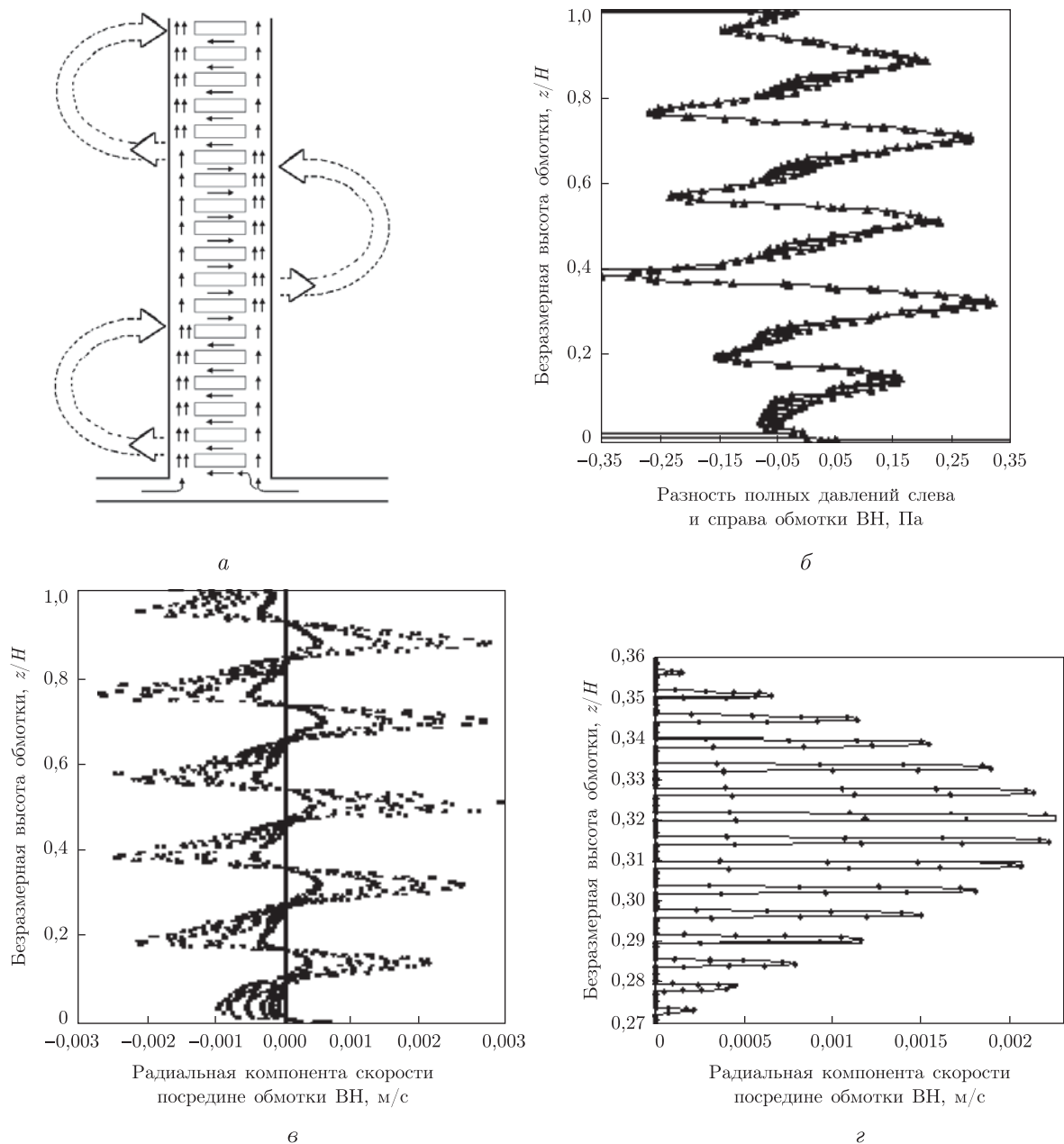


Рис. 2. Гидродинамика процессов в горизонтальных каналах: *a* — схема движения масла по каналам; *б* — распределение перепада полного давления по высоте обмотки ВН с 1-й (внизу) по 156-ю катушку (вверху); *в* — распределение радиальной компоненты вектора скорости по относительной высоте обмотки ВН; *г* — распределение радиальной компоненты вектора скорости по высоте обмотки ВН с 42-й (внизу) по 57-ю катушку (вверху)

тальных количественных полей температур, давлений и скоростей наблюдать и объяснять такое движение охлаждающего масла в каналах.

Образование зигзагообразного течения охлаждающей жидкости в горизонтальных каналах обмоток (рис. 2) можно объяснить взаимодействием полей скорости и возникающего при движении поля давления, которые в результате интенсивного тепловыделения в катуш-

ках и нагрева масла, а также влияния архимедовой силы сначала инициируют движение в одном направлении горизонтальных каналов, а после достижения определенного уровня градиента давления в результате действия закона сохранения массы возникает торможение образовавшегося коллективного движения и инверсия его направления.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что в совокупности каналов формируется макроструктура течения в последовательных группах однотипных каналов (от 3 до 15 каналов в зависимости от режима охлаждения, мощности и распределения объемных тепловыделений). Направление течения в соседних группах каналов должно быть противоположным, что определяется законом сохранения массы (уравнением неразрывности).

При этом, как видно из рис. 2, *г*, максимальное значение радиальной компоненты вектора скорости в рассматриваемой группе каналов $\approx 2,2 \cdot 10^{-3}$ м/с и имеет место приблизительно в среднем канале группы. В остальных каналах группы максимальное значение скорости уменьшается приблизительно по параболическому закону. В крайних каналах величина радиальной компоненты вектора скорости на порядок меньше ($1,4 \cdot 10^{-4} \div 2,1 \cdot 10^{-4}$ м/с) по сравнению с центральным, и процесс теплопереноса в них происходит преимущественно за счет механизма теплопроводности. Качественно аналогичный характер течения наблюдается и в остальных группах каналов с одинаковым направлением радиальной компоненты вектора скорости.

На рис. 3 представлено неоднородное поле температур в интервале 75,0–86,86 °С в области обмоток НН и ВН силового трансформатора мощностью около 210 МВ · А. Поле температур в катушках обмоток при возникновении рассматриваемого характера течения теряет осевую симметрию, что связано со сквозным течением охлаждающего масла в выделенном направлении по радиусу катушек, как это представлено на рис. 3. Из анализа распределения температур в катушках обмоток можно определить зоны максимальных температур. В случае превышения максимально допустимых уровней температур необходимо разработать предложения по изменению элементов конструкции с целью их уменьшения. В горизонтальных каналах с максимальными значениями скоростей масла значения коэффициентов теплоотдачи составляют около 100 Вт/(м² · К), в то время как в крайних каналах (области застойных зон) значения коэффициентов теплоотдачи уменьшаются до ~ 50 Вт/(м² · К). В областях, примыкающих к внутреннему и наружному вертикальному охлаждающему каналу, в результате образования или разрушения пограничных слоев на боковых вертикальных поверхностях катушек разность локальных температур между поверхностью катушки и маслом минимизируется, а коэффициент теплоотдачи значительно увеличивается.

Таким образом, проведенное исследование позволило выявить особенности структуры потока охлаждающей жидкости при течении в системе большого количества взаимосвязанных каналов маслonaполненных силовых трансформаторов. Установлено, что в совокупности достаточно большого количества горизонтальных межкатушечных каналов может происходить самоорганизация гидродинамических процессов с образованием однонаправленного течения по группам каналов, что существенным образом влияет на тепловое состояние рассмотренного оборудования, смещая области максимальных температур по высоте обмотки и в направлении радиальной компоненты вектора скорости.

1. Lee J. Y., Lee S. W., Woo J. H., Hwang I. S. CFD analyses and experiments of a winding with zig-zag cooling duct for a power transformer // CIGRE. Internat. Conf. on Large High Voltage Electric Systems. – Paris, 22 th – 27th August, 2010. – Report Nr. A2-310, in Proc. 43th Session, sec. A2, 2010. – P. 1–8.
2. Picher P., Torriano F., Chaaban M. et al. Optimization of transformer overload using advanced thermal modeling // Ibid. – Report Nr. A2-305, in Proc. 43th Session, sec. A2, 2010. – P. 1–10.

3. Круковский П. Г., Яцевский В. А., Конторович Л. Н. и др. Методические подходы к CFD-моделированию тепловых режимов силовых масляных трансформаторов // Промышл. теплотехника. – 2008. – 30, № 6. – С. 57–66.
4. Киш Л. Нагрев и охлаждение трансформаторов / Пер. с венг. М. А. Бики / Под ред. Г. Е. Тарле. – Москва: Энергия, 1980. – 208 с.
5. Швидлер А. Б., Михайловский Ю. А., Чередниченко Г. Б., Клименко Л. А. Теплоотдача внутренних катушечных обмоток трансформаторов // Электротехника. – 1980. – № 7. – С. 19–21.

*Институт технической теплофизики
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 18.04.2012

П. Г. Круковский, В. А. Яцевский

Гідродинамічні особливості течії та теплообміну у взаємопов'язаних каналах силових масляних трансформаторів

За допомогою чисельного моделювання досліджено теплові та гідродинамічні процеси в системі великої кількості взаємопов'язаних каналів силових масляних трансформаторів, що дозволило виявити ефекти самоорганізації гідродинамічних процесів з утворенням однонаправленої течії по групах каналів. Ці особливості течії істотно впливають на тепловий стан розглянутого устаткування.

P. G. Krukovsky, V. A. Yatsevsky

The hydrodynamic peculiarities of a flow and the heat transfer in the interconnected channels of oil power transformers

With the help of numerical simulation, we have investigated the thermal and hydrodynamic processes in a system of a great number of interconnected channels of oil power transformers, which allowed us to reveal the self-organization effects in hydrodynamic processes with the formation of a unidirectional flow in channel groups. These peculiarities of the flow substantially affect the thermal state of the considered equipment.



УДК 669.295:539.

© 2012

Академік НАН України М. О. Азаренков, В. Г. Кіріченко,
О. В. Коваленко, С. В. Литовченко

Фазові перетворення інтерметалідів та моделювання ядерних трансмутаційних ефектів у цирконієвих сплавах

Наведено результати моделювання ядерних трансмутаційних ефектів у цирконієвих сплавах. Ядерна трансмутація в цирконієвих сплавах призводить до еволюції мікроструктури інтерметалідів, яка пов'язана з перетворенням елементів ($Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$, $Fe \rightarrow Mn$, Co , $Cr \rightarrow V$, Mn , Fe , $V \rightarrow Cr$). Цирконієві сплави отримані методом електронно-променевої плавки з добавками Fe, Nb, Cr, Mo, V, Cu, Ta. Дослідження фазового складу сплавів проводилося за допомогою ядерної гамма-резонансної спектроскопії. Було встановлено, що мікроструктура модельних потрійних сплавів, що трансмутували, відрізняється від мікроструктури вихідних сплавів. Ця різниця визначається особливостями кристалізації і фазоутворення у сплавах. У сплавах Zr–Fe основна частина атомів заліза пов'язана в фазах Zr_3Fe і Zr_2Fe , у сплавах Zr–Fe–V і Zr–Fe–Cr – в змішаних фазах $Zr(Fe, V)_2$ і $Zr(Fe, Cr)_2$, у сплавах Zr–Fe–Mo – в фазах $(Zr, Mo)_2Fe$ і $(Zr, Mo)Fe_2$, у сплавах Zr–Fe–Nb – в фазах $(Zr, Nb)_2Fe$ і $(Zr, Nb)Fe_2$, у сплавах Zr–Fe–Ta – в фазах $(Zr, Ta)_2Fe$ і $(Zr, Ta)Fe_2$. Кристалічна структура і фазовий склад вихідних і утворених після трансмутації інтерметалідів різні. Ансамблі інтерметалідів у вихідних і утворених після трансмутації сплавах характеризуються відмінними один від одного типами зв'язку з цирконієвою матрицею. Показано, що можливим варіантом фазоутворення в модифікованих сплавах і еволюції мікроструктури в таких сплавах є нерегулярне гетерогенне утворення фазових включень іншого складу і структури порівняно з вихідними сплавами.

Ядерний паливний цикл (ЯПЦ) в атомній енергетиці України має складатися з видобутку ядерного палива і його збагачення, виробництва конструкційних матеріалів та виготовлення тепловидільних елементів (ТВЕЛів) для активної зони ядерних реакторів, вигорання палива в активній зоні ядерних реакторів і виробництва електроенергії, переробки та регенерації відпрацьованого ядерного палива (ВЯП), видалення та захоронення радіоактивних відходів (РАВ) [1]. В цій низці особлива увага приділяється проблемі конструкційних матеріалів ядерних реакторів [2].

Цирконієві сплави з різними легуючими домішками при експлуатації в діапазоні 570–590 К у воді високих параметрів в умовах інтенсивного нейтронного опромінення мають прийнятні механічні характеристики та високу корозійну стійкість [3]. При підвищенні температури експлуатації, що дозволяє збільшити ступінь вигорання ядерного палива, характеристики цирконієвих сплавів істотно погіршуються. На всіх етапах ЯПЦ важливу роль відіграють ядерні трансмутаційні ефекти, що відбуваються у конструкційних матеріалах активної зони ядерних реакторів і призводять до модифікування вихідного складу та мікроструктури сплавів. Для теплових нейтронів основним процесом ядерних перетворень є радіаційний захват нейтрона ядрами в реакції (n, γ). Аналіз трансмутаційних ефектів та їхніх наслідків у сплавах цирконію — основного конструкційного матеріалу оболонки ТВЕЛів — є досить важливим. Одним із шляхів створення перспективних цирконієвих сплавів є пошук оптимальних комбінацій і концентрацій легуючих елементів для комплексного легування цирконію, оптимізація режимів термомеханічної обробки (ТМО) і модифікація поверхні сплавів спеціальним зовнішнім впливом. В результаті таких процедур буде забезпечений такий структурно-фазовий стан сплаву і, відповідно, створеного з нього виробу, що забезпечує його оптимальну тривалу роботу в умовах підвищеної температури, корозійно-активного середовища та інтенсивного нейтронного опромінення.

Метою даної роботи є дослідження структурно-фазових перетворень та моделювання і вивчення наслідків ядерних трансмутаційних ефектів в цирконієвих сплавах.

Моделювання ядерних трансмутаційних ефектів у сплавах. Збільшення терміну експлуатації цирконієвих ТВЕЛів приводить до тривалішого впливу опромінення на матеріал та, відповідно, до підвищення ступеня протікання можливих ядерних перетворень (ядерних реакцій трансмутації). Результатом таких процесів при нейтронному опроміненні сплавів в умовах експлуатації можуть бути утворення в металевій матриці Zr, що легується добавками (Nb, Sn, Ni, Fe, Cr) та вміщує технологічні домішки (O, Si, S, H), хімічних елементів, які відсутні у вихідних сплавах до опромінення. Утворення хімічних елементів при ядерній трансмутації є результатом уповільнення та радіаційного захоплення теплових нейтронів і залежить від концентрації вихідних елементів, потоку нейтронів, перетинів ядерних реакцій, тривалості опромінення і ступеня збагачення палива.

Дослідження трансмутаційних ефектів в цирконієвих сплавах ускладнюється внаслідок значної наведеної радіоактивності оболонки ТВЕЛів та змін структурно-фазового стану сплавів при зниженні рівня наведеного опромінення. Тому розробка нових методів моделювання трансмутаційних ефектів в нерадіоактивних сплавах цирконію є дуже актуальною [4].

Більшість хімічних елементів, що використовують для легування цирконію, мають малу розчинність в α -Zr (крім ніобію). Це практично завжди призводить до утворення в металічній матриці сплавів інтерметалічних включень складної структури та різного складу. В ході попередніх досліджень [5, 6] були отримані експериментальні дані про кінетику та механізми фазових перетворень інтерметалічних фаз у багатокомпонентних сплавах і модельні уявлення про закономірності утворення, формування, еволюції та сегрегації фаз.

Основною ідеєю роботи є припущення про можливість проведення моделювання і дослідження трансмутаційних ефектів з використанням різних модельних рядів нерадіоактивних цирконієвих сплавів на основі даних про ідентифікацію інтерметалічних фаз у сплавах на основі цирконію. Вихідним рядом варто вважати сплави з добавками хімічних елементів, що відповідають набору елементів, наявних у матеріалі ТВЕЛів (цирконієвих або, припустимо, сталевих, алюмінієвих тощо) до початку реакторної кампанії. Наступний ряд повинен бути набором нерадіоактивних сплавів з легуючими добавками хімічних елементів, що можуть

утворитися в результаті ядерних трансмутаційних ефектів. Збільшуючи число таких рядів з відповідною зміною хімічного і фазового складу, можна отримати практично необмежені можливості моделювання і аналізу впливу ядерних трансмутаційних ефектів на структуру та еволюцію мікроструктури і складу інтерметалічних фаз у сплавах, наприклад, на основі цирконію.

Вихідними компонентами конструкційних матеріалів ТВЕЛів на основі цирконію є, насамперед, Zr та Nb, а також Sn, Cr, Fe та Ni. При взаємодії з тепловими нейтронами трансмутаційні ядерні реакції на ядрах цирконію і легуючих елементів в цирконієвих сплавах приводять до утворення набору нових елементів, таких як Mo, Co, Mn, V, Cu. Ці елементи у вихідних сплавах практично відсутні.

У даній роботі при проведенні ядерно-фізичного дослідження та металознавчого моделювання трансмутаційних ефектів у нерадіоактивних сплавах цирконію модельними вихідними сплавами були вибрані сплави на основі цирконію з добавками заліза, ніобію і хрому. Металознавче моделювання трансмутаційних процесів проводили для низки модифікованих сплавів на основі цирконію з добавками молібдену, ванадію, міді та танталу. Такий підхід є повністю виправданим, оскільки, за даними роботи [7], трансмутація ядер легуючих елементів Cr, Fe, Ni не впливає на мікроструктуру сплавів цирконію.

Методика експериментальних досліджень. Для досліджень використовували йодидний цирконій чистотою 99,76% (ваг.), вміст домішок якого наведений у табл. 1.

Серед цих елементів необхідно виділити Nb, Fe, Hf, Cu, Ni, Ti, Mo через їхню технологічну важливість для властивостей сплавів. У цирконії, що отриманий іншими методами, вміст технологічних добавок може бути вищим. На основі йодидного цирконію електронно-променевим плавленням у вакуумі були виготовлені сплави, наведені у табл. 2.

Добавки заліза були збагачені стабільним ізотопом Fe⁵⁷ до 85%. Використовували ванадій марки ВЕЛ-1 та інші домішки з чистотою: Cr — 99,85, Nb — 99,85, Mo — 99,7, Ta — 99,7%. Після плавки шихти зливки піддавали гомогенізуючому відпалу у вакуумі $1,3 \cdot 10^{-4}$ Па тривалістю 50 год при 973 К. Рентгенографічні дослідження сплавів проводили іонізаційним

Таблиця 1. Домішки в йодидному цирконії

Елемент	Hf	Nb	Fe	Ti	Ni	Mo	Ca	Sn	Al	Cu
Вміст, % (ваг.)	0,05	0,03	0,02	0,02	0,01	0,007	< 0,01	< 0,01	0,005	0,004
Елемент	C		O ₂		Si		N ₂		B	
Вміст, % (ваг.)	0,02		0,02		0,006		0,005		0,00005	

Таблиця 2. Склад досліджених сплавів на основі цирконію

Сплав	Вміст елементів, % (ат.)							
	Fe	Nb	Cr	Mo	V	Cu	Ta	Hf
Zr-0,51%Fe	0,51	0,03		0,007		0,005		0,03
Zr-1,03%Fe	1,03	0,03		0,007		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-0,5%Nb	0,51	0,5		0,007		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-1%Nb	0,51	1,0		0,007		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-2,5%Nb	0,51	2,5		0,007		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-0,5%Cr	0,51	0,03	0,5	0,007		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-0,5%Mo	0,51	0,03		0,5		0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-0,28%V	0,51	0,03		0,007	0,28	0,005		0,03
Zr-0,51%Fe-0,28%V-0,6%Cu	0,51	0,03		0,007	0,28	0,6		0,03
Zr-0,51%Fe-0,8%Ta	0,51	0,03		0,007		0,005	0,8	0,03

методом на установці ДРЗП-3.0 у $\text{Cu}_{k\alpha}$ -випромінюванні. Для відпалених зразків точність у визначенні параметрів ґрат a та c становила $5 \cdot 10^{-4}$ Å. Рентгенівський аналіз показав, що на всіх етапах ТМО сплавів на основі цирконію фазовий склад представлений α -фазою Zr. Месбауерівські спектри поглинання реєстрували з використанням ядерного гамма-резонансного спектрометра ЯГРС-4 М. Для реєстрації спектрів поглинання при $T = 80$ К та $T = 4,2$ К зразки розташовували в кріостаті типу Р-118. Оцінку розмірів виділень других фаз проводили з використанням електронного мікроскопу ЕМ-200.

Результати експериментальних досліджень та обговорення. Застосуємо запропоновану вище схему моделювання трансмутаційних ефектів. Взаємодія з тепловими нейтронами і ядерні перетворення сплавів визначаються характеристиками ізотопів елементів, що входять до складу сплавів цирконію. Об'ємні зміни при ядерних перетвореннях характеризуються розмірним фактором $\Delta V/V$, де ΔV — різниця атомних об'ємів, а V — об'єм атома матриці. У випадку сплавів цирконію продуктами ядерних перетворень є такі хімічні елементи:

Zr \rightarrow Mo (об'ємний розмірний фактор $\Delta V/V$ відносно Zr дорівнює $-0,34$), а також Y ($+0,45$), Sr ($+0,43$); у найбільшій кількості утворюється Mo (150–160 р. р. м. за кампанію реактора ВВЕР-1000);

Nb ($+0,22$) \rightarrow Mo ($-0,34$), Y ($+0,45$), Zr (0);

Sn ($-0,037$) \rightarrow In ($-0,055$), Sb ($+0,019$), Te ($-0,372$);

Fe ($-0,51$) \rightarrow Mn ($-0,46$), Co ($-0,51$);

Cr ($-0,49$) \rightarrow V ($-0,41$), Mn ($-0,46$) і Fe ($-0,51$);

Ni ($-0,53$) \rightarrow Co ($-0,51$), Fe ($-0,51$), Cu ($-0,49$);

V ($-0,41$) \rightarrow Cr ($-0,49$);

Si \rightarrow S, P.

Також можливим є утворення Ta в результаті трансмутації Hf. Вміст добавок (крім Mo), що утворилися після трансмутації, становить одиниці та долі р. р. м. Для наведених у табл. 2 сплавів на основі цирконію розглянемо два ряди: вихідний і модифікований (табл. 3). З металознавчої точки зору розглянуті потрібні сплави цирконію Zr–Fe–Me можна розділити на дві групи, що характеризуються подібністю діаграм стану бінарних систем Zr–Me у кожній групі.

Таблиця 3. Обрані для моделювання трансмутаційних ефектів вихідна та модифікована низки сплавів на основі цирконію

Вихідні сплави	Обрані ядерні перетворення	Розмірний ефект відносно Zr, $(\Delta V/V)_{\text{ат}}$	Модифіковані сплави, що моделюють трансмутаційні ефекти
Zr–0,51%Fe	Zr \rightarrow Mo	Zr (0), Fe ($-0,51$)	Zr–0,51%Fe–0,3%Mo
Zr–1,03%Fe	Zr \rightarrow Mo	Zr (0), Fe ($-0,51$)	Zr–0,51%Fe–0,5%Mo
Zr–0,51%Fe–0,5%Nb	Zr \rightarrow Mo,	Mo ($-0,34$),	Zr–0,51%Fe–0,3%Mo
Zr–0,51%Fe–1,0%Nb	Nb \rightarrow Mo	Nb ($+0,22$)	Zr–0,51%Fe–0,5%Mo
Zr–0,51%Fe–0,5%Cr	Zr \rightarrow Mo,	Mo ($-0,34$),	Zr–0,51%Fe–0,3%Mo,
	Cr \rightarrow V,	Cr ($-0,49$),	Zr–1,03%Fe,
	Cr \rightarrow Fe	V ($-0,41$)	Zr–0,51%Fe–0,5%V
Zr–0,51%Fe–0,5%V	Zr \rightarrow Mo,	Mo ($-0,34$),	Zr–0,51%Fe–0,5%Cr
	V \rightarrow Cr	V ($-0,41$),	Zr–0,51%Fe–0,3%Mo
		Cr ($-0,49$)	

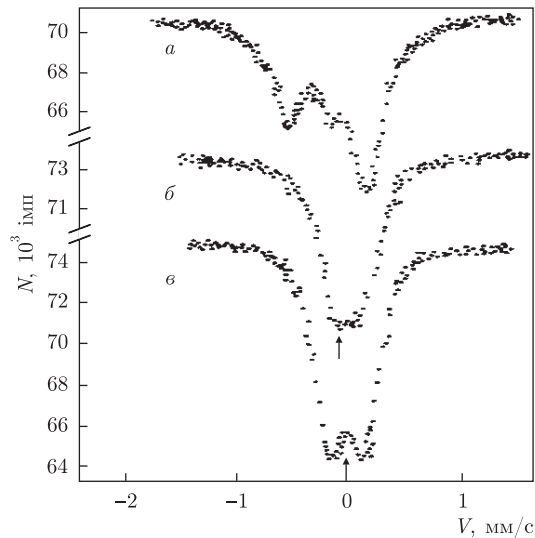


Рис. 1. Спектри поглинання сплавів при 300 К: *a* — Zr-1,03% Fe; *б* — Zr-0,51%Fe-0,5%Cr; *в* — Zr-0,51%Fe-0,5%Mo

Першу групу складають сплави з добавками V, Cr, Mo. У бінарних сплавах цирконію з цими металами утворюється тільки одна проміжна фаза $ZrMe_2$, а розчинність Me в α -Zr при кімнатній температурі мізерно мала. Температура утворення фази $ZrMe_2$ підвищується в послідовності V, Cr, Mo. Відповідно до збільшення температури плавлення добавки зростає і температура утворення евтектики.

До другої групи належать потрійні сплави, що містять Nb і Ta. Розчинність Nb і Ta в α -Zr при кімнатній температурі мала, але через близькість атомних радіусів Zr, Nb і Ta існує безперервний ряд твердих розчинів Zr з Nb і Ta в β -області [8, 9].

У розглянутих сплавах можуть реалізуватися три варіанти утворення інтерметалідів. По-перше, незалежно одне від одного можуть утворюватися інтерметаліди систем Zr–Fe та Zr–Me. По-друге, можливе формування інтерметалідів змішаного складу, що містять Zr, Fe та Me. І, нарешті, не виключено випадання інтерметалідів бінарної системи Fe–Me.

Месбауерівський спектр поглинання сплаву Zr-1,03%Fe при кімнатній температурі є дублетом, де правий компонент інтенсивніший за лівий (рис. 1, *a*). Відпал зменшує асиметрію інтенсивностей ліній дублета, але повного вирівнювання інтенсивності не відбувається.

Загальний вигляд спектра та асиметрія інтенсивності компонентів дублета зберігаються і при зниженні температури до 80 і 4,2 К. Положення спектра δ і величина розщеплення Δ є близькими до відповідних значень спектра інтерметаліду Zr_3Fe .

Перетворення $V \rightarrow Cr$, $Cr \rightarrow V$, $Cr \rightarrow Fe$. Введення ванадію і хрому в сплав Zr–Fe приводить до значних змін спектра: замість дублета виникає одиночна розширена лінія (рис. 2, 3). Зменшення градієнта електричного поля на ядрах Fe^{57} свідчить про утворення фаз змішаного складу на основі ZrV_2 та $ZrCr_2$ відповідно. Формуванню цих фаз сприяють такі фактори. Лінії ліквідусу в системах Zr–V та Zr–Cr розташовані вище відповідної лінії в системі Zr–Fe для багатих цирконієм сплавів. У системі Zr–V існує єдиний інтерметалід ZrV_2 з кубічною структурою типу C15.

Інтерметалід $ZrCr_2$ також має кубічну кристалічну структуру типу C15. Зменшення температури зразків до 80 та 4,2 К розширює лінію спектра сплаву Zr–Fe–V (див. рис. 2).

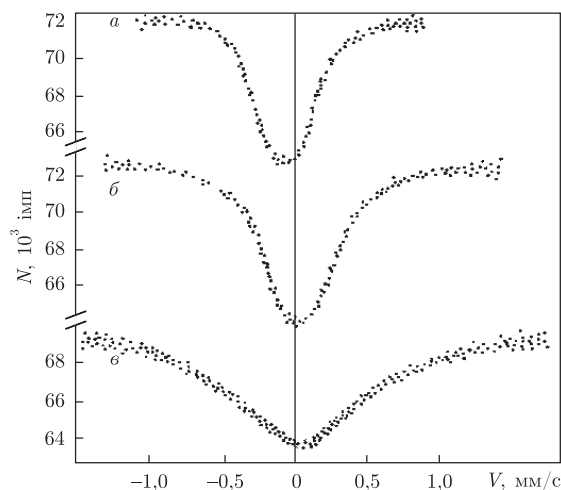


Рис. 2. Спектри поглинання відпаленого сплаву Zr–Fe–V при: *a* – 300 К; *б* – 80 К; *в* – 4,2 К

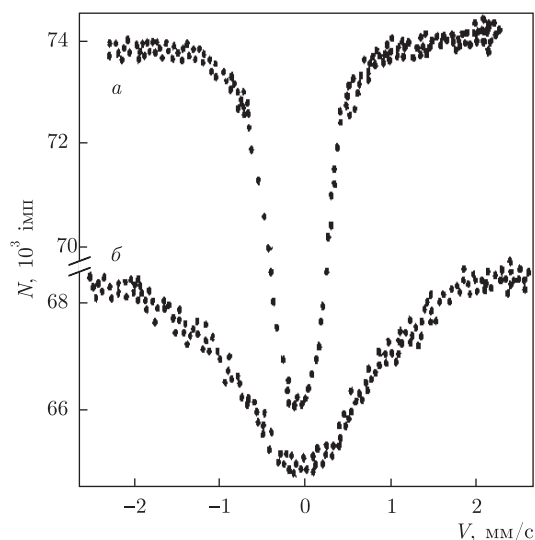


Рис. 3. Спектри поглинання відпаленого сплаву Zr–Fe–Cr: *a* – 80 К; *б* – 4,2 К

Це розширення обумовлене кристалографічними та магнітними перетвореннями. Відомо, що кубічна фаза ZrV_2 перетворюється в орторомбічну при 121 К. При зниженні температури до 80 та 4,2 К спектр сплаву Zr–Fe–Cr також розширюється, що може бути пов'язане з тим, що у цьому діапазоні температур протікають кристалографічні і магнітні перетворення у виділеннях фази $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$ (див. рис. 3). Через близькість атомних радіусів заліза, ванадію та хрому спостерігається формування фаз $Zr(Fe_{x-1-x})_2$ та $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$ з заміщенням атомами Fe атомів V і Cr у фазах ZrV_2 та $ZrCr_2$.

Таким чином, при вірогідному трансмутаційному перетворенні $Cr \rightarrow V$, $Cr \rightarrow Fe$, $V \rightarrow Cr$ істотно змінюється фазовий склад і структура інтерметалічних фаз в потрійних сплавах цирконію з домішками (Fe, V) або (Cr, Fe), що в свою чергу може впливати на міцність сплавів, їхню радіаційну та корозійну стійкість.

Перетворення $Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$. Розглянемо результат вірогідних трансмутаційних перетворень $Zr \rightarrow Mo$. Проаналізуємо месбауерівські дані для сплаву

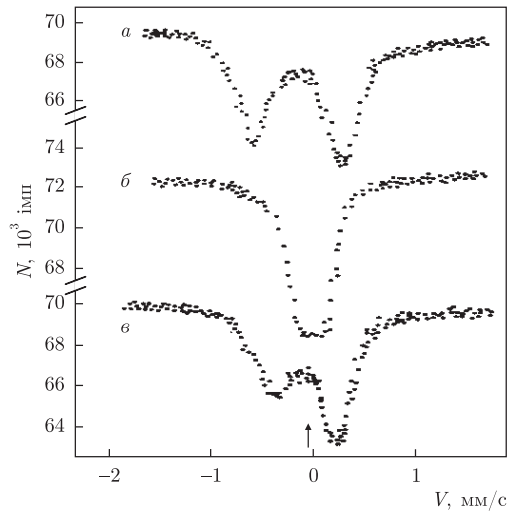


Рис. 4. Спектри поглинання сплавів Zr–Fe–Nb: *а* — вихідний; *б* — після відпалу (970 К, 5 год); *в* — сплаву Zr–Fe–Ta після відпалу (970 К, 5 год)

Zr–0,51%Fe–0,3%Mo. Хоча ефективні валентності Cr і Mo є близькими, велика різниця атомних розмірів призводить до утворення фаз з заміщенням атомів Zr атомами Mo. Саме через це вплив добавки Mo відрізняється від впливу добавок V та Cr. Спектр невідпаленого сплаву Zr–Fe–Mo сильно розширений і має інтенсивну праву компоненту. Після відпалу помітнішою стає дублетна структура спектра (рис. 1, *в*). У сплавах Zr–Fe–Mo в інтервалі температур 973–1273 К інтерметаліди представлені фазами $ZrMo_2$ та $ZrFe_2$. Фаза $ZrFe_2$ при кімнатній та нижчих температурах є феромагнітною, характеризується спектром поглинання з шести ліній, але в нашому випадку ця фаза не утворюється. Дублетна структура спектрів (рис. 1, *а* та 1, *в*) підтверджує, що залізовмісний інтерметалід формується на основі структури типу C16, у якій кристалізується фаза Zr_2Fe . Відпал сприяє перерозподілу атомів Fe та Mo, в результаті якого відбувається розпад вихідного сплаву на фази $ZrMo_2$ та $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$ з розчиненими в ній атомами Mo, що заміщують атоми Zr. Про наявність в фазі Zr_2Fe атомів Mo свідчить менша порівняно зі сплавом Zr–Fe величина розщеплення. Анізотропія інтенсивностей ліній дублета сплавів Zr–Fe–Mo свідчить про наявність інших фаз у сплаві. Заміщення атомами Fe атомів Zr або Mo в $ZrMo_2$ є малоімовірним через несприятливість розмірних факторів, тому такою фазою буде фаза Лавеса $(Zr_xMo_{1-x})Fe_2$.

Таким чином, з огляду на можливий фазовий склад потрібної системи Zr–Fe–Mo [9, 10], можна вважати, що в α -області залізовмісні фази представлені фазами $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$ та $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$. Різний характер впливу добавки Mo та добавок V і Cr на формування інтерметалідів у сплаві Zr–Fe пов'язаний з розмірним фактором.

Введення Nb у сплав Zr–Fe приводить до розширення ліній спектра та зменшення розщеплення дублета (рис. 4). Відпал істотно змінює фазовий склад сплаву: замість дублетного спектра поглинання спостерігається окрема розширена лінія (рис. 4, *б*). У багатих цирконієм сплавах Zr–Fe–Nb, що містять не більше 15% (ваг.) (Nb + Fe), в інтервалі температур 873–1373 К утворюється фаза Zr_2Fe . Аналіз наведених на рис. 3, *а* та 3, *б* спектрів свідчить про помітну кількість цієї фази в α -області.

Як і у випадку сплаву Zr–Fe–Mo, сильна асиметрія інтенсивностей компонентів дублета свідчить про наявність виділень фази змішаного складу $(Zr_xNb_{1-x})Fe_2$. Ця фаза має струк-

туру типу C15 для $x > 0,65$ і структуру типу C14 для $x < 0,55$. Ізомерний зсув $(Zr_xNb_{1-x})Fe_2$ і квадрупольне розщеплення для структур C15 та C14 при кімнатній температурі не залежать від складу (величина сталих квадрупольної взаємодії дорівнює відповідно 0,7 та 0,9 мм/с). Отже, у сплавах Zr–Fe–Nb на основі цирконію в α -області формуються фази типу $(Zr, Nb)_2Fe$ та $(Zr, Nb)Fe_2$.

Утворення Та в результаті трансмутації Нф. Спектр поглинання невідпаленого сплаву Zr–Fe–Та є розмитим. Відпал приводить до звуження спектра, причому з'являється невелике квадрупольне розщеплення (рис. 4, в). За аналогією зі сплавом Zr–Fe–Nb у цьому випадку також можна припустити наявність принаймні двох залізовмісних фаз. Одна з них кристалізується на основі сполуки Zr_2Fe — це інтерметалід $(Zr, Ta)_2Fe$, що розпадається при відпалі. Інша фаза кристалізується на основі інтерметаліду $TaFe_2$ та має склад $(Zr, Na)Fe_2$.

Прийнято вважати, що працездатність сплавів, наприклад, сплаву Zr–Nb, у якому стабілізуючим елементом у матриці є ніобій, визначається наявністю домішок і трансмутаційним утворенням підрозмірних атомів Мо з вихідних атомів Zr та Nb. Розподіл атомів є рівномірним в об'ємі сплаву [11–13]. Але результати нашого дослідження свідчать про можливість реалізації різноманітних варіантів утворення сполук і фаз з неоднорідними включеннями трансмутаційних атомів у модифікованих сплавах.

Стабільність роботи виробів із цирконієвих сплавів в активній зоні ядерних реакторів після трансмутації $Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$ пояснюється не тільки підрозмірністю атомів Мо, що утворюються (для Мо величина $\Delta V/V = -0,34$). Вірогідним наслідком трансмутаційного перетворення може бути відповідне зменшення повзучості, яке супроводжується, по-перше, збільшенням температури евтектики в системі Zr–Мо, а, по-друге, формуванням після трансмутації фази змішаного складу $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$.

Таким чином, після трансмутації під впливом нейтронного опромінення в сплавах Zr–1%Nb та Zr–2,5%Nb в результаті перетворення $Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$ обов'язково утвориться фаза $ZrMo_2$, або при наявності домішок заліза — фаза $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$.

Ці особливості впливу трансмутаційних ефектів вперше відзначені в нашій роботі. Придатність використання сплавів цирконію з добавками хрому пояснюється, можливо, тим, що структура та властивості вихідної фази $Zr(Fe_xCr_{1-x})_2$ в широкому діапазоні температур (див. рис. 3) і фази $Zr(Fe_xV_{1-x})_2$ (див. рис. 2), що утворюється після можливої трансмутації типу $Cr \rightarrow V$, є подібними. Це відіграє свою позитивну роль і після трансмутації при подальшому опроміненні, наприклад при перетворенні $V \rightarrow Cr$. Отже, внаслідок малої різниці в об'ємних розмірних факторах атомів вихідних легуючих елементів Cr, Fe, Ni та атомів V, Mn, Cu, що утворюються після трансмутації, вплив опромінення на еволюцію мікроструктури сплавів цирконію є незначним.

Таким чином, запропоновано і експериментально перевірено новий метод моделювання трансмутаційних ефектів в нерадіоактивних сплавах цирконію. Мікроструктура потрійних сплавів, що моделюють трансмутаційні явища, відрізняється від мікроструктури вихідних сплавів і визначається механізмами кристалізації подвійних і потрійних сплавів на основі цирконію та особливостями фазоутворення. Кристалічна структура і тип інтерметалідів у вихідних та утворених після можливої трансмутації модельних сплавах різняться. Так, після трансмутації під впливом нейтронного опромінення в сплавах Zr–1%Nb та Zr–2,5%Nb в результаті перетворення $Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$ обов'язковим є утворення фази $ZrMo_2$ або при наявності домішок заліза — фаза $(Zr_{1-x}Mo_x)_2Fe$. Вихідні сплави та сплави, що моделюють трансмутаційні ефекти, можуть мати різні властивості при імітаційному опроміненні сплавів та при корозійних випробуваннях у воді високих параметрів.

1. *Развитие* атомной энергетики России и Украины – фактор устойчивого межгосударственного сотрудничества: Материалы совместн. совещания-семинара РАН и НАНУ, 21–23 окт. 2008 г., ЛОК “Колонтаево” (г. Электросталь). – Москва: Наука, 2009. – 357 с.
2. *Воеводин В. Н., Неклюдов И. М.* Эволюция структурного состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов. – Киев: Наук. думка, 2006. – 376 с.
3. *Akebi M.* Technical Aspects/Effects at Early Days of Nuclear Development-Birth of Zirconium Alloys and Channel Type Reactors // Nuclear Safety Research Association (Japan). – 2003. – 16 p.
4. *Азаренков Н. А., Воеводин В. Н., Кириченко В. Г., Литовченко С. В.* Моделирование влияния ядерных трансмутационных эффектов на состав интерметаллидов в циркониевых сплавах // Тр. XVIII Междунар. конф. по физике радиац. явлений и радиац. материаловедению. XVIII ICPRP. – Харьков: Талант-Трейдінг, 2008. – С. 79–80.
5. *Игрушин В. В., Кириченко В. Г., Петельгузов И. А., Чекин В. В.* Влияние добавок Sn, V, Cr, Mo, Nb, и Ta на локальное окружение примесных атомов Fe в α -Zr // Физика металлов и материаловедения. – 1983. – **55**, № 6. – С. 1143–1149.
6. *Игрушин В. В., Кириченко В. Г., Петельгузов И. А., Чекин В. В.* Взаимодействие добавок ванадия и меди с примесными атомами железа в α -Zr // Изв. АН СССР. Сер. Металлы. – 1982. – № 1. – С. 87–90.
7. *Kumar A., Garner F. A.* Transmutation-induced deposition profiles in halos surrounding spherical precipitates // Radiation Eff. – 1984. – **82**. – P. 61–72.
8. *Guillenet A. F.* Thermodynamic Analysis of the Stable Phases in the Zr–Nb System and Calculation of the Phase Diagram // Z. Metallkde. – 1991. – **86**. – Н. 6. – S. 478–487.
9. *Игрушин В. В., Кириченко В. Г., Коллеров Э. П. и др.* Структурно-фазовые превращения в сложнолегированных сплавах циркония // Изв. АН СССР. Сер. Металлы. – 1989. – № 6. – С. 956–959.
10. *Дуглас Д.* Металловедение циркония. – Москва: Атомиздат, 1975. – 360 с.
11. *Miedema A. R.* Cohesion in alloys-fundamentals of a semi-empirical model // Physica. – 1980. – **100B**. No 1. – P. 1–28.
12. *Кириченко В. Г., Курдин А. И.* Ядерно-физическое материаловедение сплавов циркония // Вісн. Харк. нац. ун-ту ім. В. Н. Каразіна. Сер. фізична “Ядра, частинки, поля”. – 2008. – Вип. 3/39/, № 823. – С. 25–45.
13. *Maussner G., Ortlieb E., Weidinger H.-G.* Basic properties of zirconium alloys with respect to mechanical and corrosion behavior // Mater. Nucl. React. Core Appl.: Proc. Int. Conf., Bristol. 27–29 Oct., 1987. – Vol. 1. – London, 1987. – С. 49–55.

Харківський національний університет
ім. В. Н. Каразіна

Надійшло до редакції 05.01.2012

Академик НАН Украины **Н. А. Азаренков, В. Г. Кириченко, О. В. Коваленко, С. В. Литовченко**

Фазовые превращения интерметаллидов и моделирование ядерных трансмутационных эффектов в циркониевых сплавах

Представлены результаты моделирования ядерных трансмутационных эффектов в циркониевых сплавах. Ядерная трансмутация в циркониевых сплавах приводит к эволюции микроструктуры интерметаллидов, которая связана с превращением элементов ($Zr \rightarrow Mo$, $Nb \rightarrow Mo$, $Fe \rightarrow Mn$, Co , $Cr \rightarrow V$, Mn , Fe , $V \rightarrow Cr$). Циркониевые сплавы получены методом электронно-лучевой плавки с добавками Fe, Nb, Cr, Mo, V, Cu, Ta. Исследование фазового состава сплавов проводилось с помощью ядерной гамма-резонансной спектроскопии. Было установлено, что микроструктура модельных трансмутировавших тройных сплавов отличается от микроструктуры исходных сплавов. Это различие определяется особенностями кристаллизации и фазообразования в сплавах. В сплавах Zr–Fe основная часть атомов железа связана в фазах Zr_3Fe и Zr_2Fe . В сплавах Zr–Fe–V и Zr–Fe–Cr же-

лезно связано в смешанных фазах $Zr(Fe, V)_2$ и $Zr(Fe, Cr)_2$, в сплавах $Zr-Fe-Mo$ — в фазах $(Zr, Mo)_2Fe$ и $(Zr, Mo)Fe_2$, в сплавах $Zr-Fe-Nb$ — в фазах $(Zr, Nb)_2Fe$ и $(Zr, Nb)Fe_2$, в сплавах $Zr-Fe-Ta$ — в фазах $(Zr, Ta)_2Fe$ и $(Zr, Ta)Fe_2$. Кристаллическая структура и фазовый состав исходных и образовавшихся после трансмутации интерметаллидов различны. Ансамбли интерметаллидов в исходных и образовавшихся после трансмутации сплавах характеризуются отличными друг от друга типами связи с циркониевой матрицей. Показано, что возможным вариантом фазообразования в модифицированных сплавах и эволюции микроструктуры в таких сплавах является нерегулярное гетерогенное образование фазовых включений другого состава и структуры по сравнению с исходными сплавами.

Academician of the NAS of Ukraine **N. A. Azarenkov, V. G. Kirichenko, O. V. Kovalenko, S. V. Lytovchenko**

Phase transformations of intermetallides and the simulation of nuclear transmutation effects in zirconium alloys

The results of simulation of the nuclear transmutation effects in zirconium alloys are presented. The nuclear transmutation in zirconium alloys causes the evolution of a microstructure of intermetallides, which is connected with the transformation of elements ($Zr \rightarrow Mo$; $Nb \rightarrow Mo$; $Fe \rightarrow Mn, Co$; $Cr \rightarrow V, Mn, Fe$; $V \rightarrow Cr$). The zirconium-based alloys were produced by electron-beam melting with additions of Fe, Nb, Cr, Mo, V, Cu, Ta. The research of the phase composition of alloys was carried out by using nuclear gamma-resonance spectroscopy. It was found that the microstructure of model after the ternary alloys transmutation differs from that of base alloys, which is determined by features of the crystallization and phase formation of alloys. In $Zr-Fe$ alloys, the main part of iron atoms is bound in Zr_3Fe and Zr_2Fe phases. In $Zr-Fe-V$ and $Zr-Fe-Cr$ alloys, Fe is bound accordingly in $Zr(Fe, V)_2$ and $Zr(Fe, Cr)_2$ mixed phases. In $Zr-Fe-Mo$ alloys, Fe is bound in $(Zr, Mo)_2Fe$ and $(Zr, Mo)Fe_2$ phases. In $Zr-Fe-Nb$ alloys, Fe is bound in $(Zr, Nb)_2Fe$ and $(Zr, Nb)Fe_2$ phases. In $Zr-Fe-Ta$ alloys, Fe is bound in $(Zr, Ta)_2Fe$ and $(Zr, Ta)Fe_2$ phases. The crystal structures and the types of initial and transmuted intermetallides are different. The ensembles of intermetallides in both cases are characterized by different connection types with the zirconium matrix. It is shown that a possible version of the phase formation in modified alloys and the microstructure evolution in such alloys are determined by the irregular heterogeneous formation of phase inclusions with another composition and structure in comparison with the base alloys.



УДК 551.35(262.5)

© 2012

С. Б. Гулін, Ю. Г. Артемов, академік НАН України В. М. Єгоров,
академік НАН України **Г. Г. Полікарпов**, Д. Б. Євтушенко

Еколого-географічний феномен: підводний канал на континентальному схилі в північно-західній частині Чорного моря

Батиметричні дослідження, що виконані в рамках міжнародної кооперації з використанням сучасного гідроакустичного обладнання, дали змогу провести детальне обстеження та вперше отримати неперервну тривимірну карту незвичайної структури на дні у північно-західній частині Чорного моря у вигляді протяжного (понад 70 км) і глибокого (до 125 м) підводного каналу (завширшки більш ніж 1100 м), пов'язаного з системою каньйонів палеодельти р. Дніпро, який проходить через увесь континентальний схил аж до абісальної рівнини та, можливо, є додатковою зв'язуючою ланкою між аеробною і анаеробною зоною Чорного моря.

Чорне море є унікальним та найбільшим на планеті анокисним водоймищем, нерідко розглядається як один з найвивченіших басейнів Світового океану. Це відноситься до його батиметрії (рельєфу і ландшафтної структури дна), а також до характеристики поверхневих та підповерхневих горизонтів донних відкладень. Разом з тим дослідження останніх років спростовують цю точку зору завдяки відкриттю масивних покладів газогідратів [1], глибоководних грязьових вулканів [2], великих полів струминних виходів газу з морського дна — так званих холодних метанових сипів [3–5] та асоційованих з ними мікробних утворень у вигляді карбонатних будов до 4 м заввишки [4–9], вік яких на різних глибинах Чорного моря хронологічно відповідає основним етапам еволюції його сірководневої зони за останні тисячоліття [8, 9]. Причому основні скупчення метанових сипів виявлено в районах стародавніх русел чорноморських річок, особливо в палеодельті р. Дніпро, розташованій на кромці континентального шельфу північно-західної частини Чорного моря і затопленої в результаті підйому рівня моря через танення льодовиків у епоху голоцену [4, 5, 10].

Одним з відкриттів такого роду стало виявлення британськими вченими підводного каналу на дні Чорного моря, завдовжки близько 60 км, завглибшки до 35 м і завширшки майже 1000 м, який простягається від протоки Босфор до чорноморської глибоководної улоговини [11]. Автори порівнюють це підводне русло з річкою, яка переносить углиб Чорного моря до $22 \text{ тис. м}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ середземноморської води, більш солоної і важкої, ніж чорноморська.

Якщо б ця підводна “річка” була наземною, то за обсягом стоку вона займала б шосте місце серед найбільших річкових артерій світу. Дане дослідження стало можливим завдяки використанню сучасних багатопромених ехолотів, які виконують роль своєрідного сканера морського дна, дозволяючи отримувати тривимірну карту його рельєфу при одноразовому проході судна над досліджуваною ділянкою. При цьому глибина дна вимірюється не тільки під кілем судна, як це роблять звичайні ехолоти, а й в усій смузі завширшки кілька сотень метрів по обидва боки від судна.

Подібний багатопроменивий ехолот марки SEABEAM-1050 (ELAC Nautik, Німеччина), що встановлений на науково-дослідному судні НАН України “Професор Водяницький”, був використаний нами в 2003–2004 рр. спільно з вченими Центру морських наук GEOMAR (Кіль, Німеччина) для високопрецизійного батиметричного обстеження палеodelьти р. Дніпро [4, 10]. В результаті досліджень нами побудована тривимірна карта даного району загальною площею 837 км², яка показала, що палеodelьта р. Дніпро залягає на глибинах від 70 до 1200 м і є Y-подібною системою підводних каньйонів (рис. 1, А).

Разом з тим конфігурація цієї батиметричної структури на більших глибинах Чорного моря до останнього часу була невідома. Для її дослідження нами проведено серію батиметричних зйомок рельєфу дна глибоководної частини континентального схилу і абісальної рівнини Чорного моря, що прилягає до палеodelьти р. Дніпро, з використанням більш потужних багатопромених ехолотів Kongsberg EM-120 (Kongsberg Maritime AS, Норвегія), встановлених на німецьких науково-дослідних суднах “Meteor” (рейс № М-72, 2007 р. і рейс № М-84, 2011 р.) та “Maria S. Merian” (рейс № MSM-15, 2010 р.) У результаті досліджень було виявлено, що центральний каньйон палеodelьти р. Дніпро має продовження у вигляді звивистого підводного каналу завдовжки не менше 70 км, завширшки до 1100 м та завглибшки до 125 м, який перетинає в південно-східному напрямі весь північно-західний континентальний схил і потім простягається вздовж кромки абісальної рівнини Чорного моря (див. рис. 1). Невеликий розрив у гідроакустичному покритті центральної частини цього каналу (див. рис. 1, Г) був обумовлений неможливістю виконання відповідного галса над цим районом внаслідок погодних умов. Тим не менш ехограми поперечних (відносно основного русла каналу) батиметричних розрізів, які були отримані за допомогою однопроменового ехолота Simrad EK-500 (Kongsberg Maritime AS, Норвегія), показали наявність каньйоноподібної структури і в даному районі (див. рис. 1, Г), підтвердивши, таким чином, безперервність підводного каналу на всій його обстеженій відстані.

Отримані результати дозволяють розглядати палеodelьту р. Дніпро і глибоководний канал, що обстежений у даному дослідженні як єдину батиметричну структуру, яка бере свій початок на кромці північно-західного шельфу Чорного моря (глибина дна близько 70 м), де водна товща є цілком окиснювальною, проходить через увесь континентальний схил аж до абісальної рівнини (глибини понад 1700 м), де придонний шар води є перманентно аноксичним через високий вміст сірководню. Подальшим продовженням цього каналу є відомий глибоководний жолоб, що проходить уздовж підніжжя континентального схилу практично по всьому периметру південної частини Кримського півострова [12].

Таким чином, широкомасштабні батиметричні дослідження, що виконані в рамках міжнародної кооперації з використанням сучасного багатопроменового гідроакустичного обладнання, дали змогу провести детальне обстеження та отримати безперервну тривимірну карту незвичайної структури на дні Чорного моря у вигляді протяжного і досить глибокого підводного каналу, пов’язаного з системою каньйонів палеodelьти р. Дніпро. Питання щодо причини утворення такої значної батиметричної структури на дні Чорного моря залишається

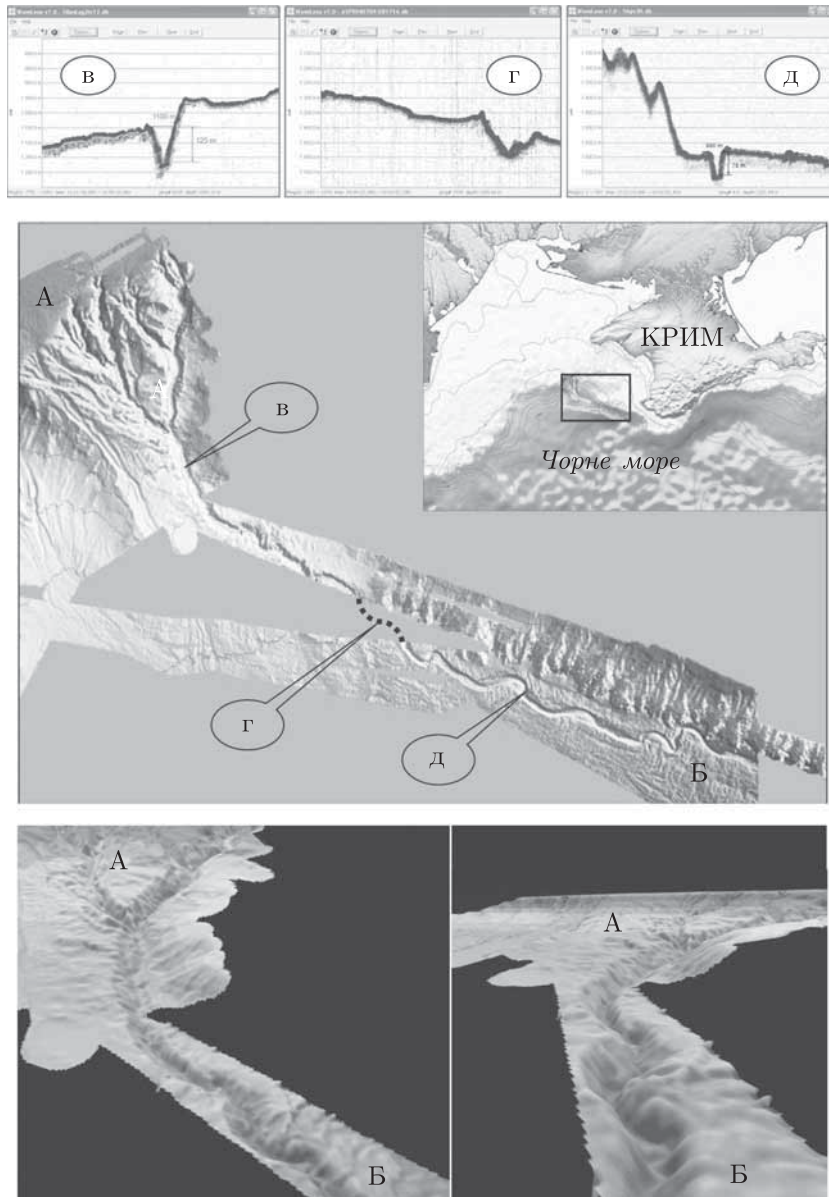


Рис. 1. Батиметрична карта палеodelьти р. Дніпро (А) і пов'язаного з нею глибоководного каналу (Б) у північно-західній частині Чорного моря, що отримана за допомогою багатопроменивих ехолотів.

На верхніх вставках (В-Д) показано ехограми з поперечним перерізом рельєфу дна глибоководного каналу в місцях, позначених на батиметричній карті тими самими символами (В-Д).

На найнижчій частині рисунка показано збільшені тривимірні зображення (А й Б) верхньої частини глибоководного каналу, що примикає до палеodelьти р. Дніпро.

Пунктирна лінія в центральній частині батиметричної карти — можливий напрям русла каналу в непокриту зйомкою з багатопроменивим ехолотом районі

ся поки що відкритим. Можливо, цей підводний канал сформувався в результаті зсуву донних відкладень, зважаючи на його близькість до континентального схилу, на якому можуть спостерігатися зсувні явища, або він є наслідком просідання поверхневого донного ґрунту над розломом, підстилаючого відкладення, або ж він відображає найдавніше річкове рус-

ло. У цьому зв'язку слід зазначити, що в 1993 р. академіком НАН України Є. Ф. Шнюковим та його колегами за допомогою підводного апарату “Север-2” були виконані візуальні спостереження в глибоководній частині району, розглянутого нами в цьому повідомленні, в результаті яких у підніжжі континентального схилу (глибина 1500–1800 м) був виявлений своєрідний рів завширшки в кілька кілометрів, заповнений дрібнозернистими пісками [13]. Науковці публікації [13] припустили, що цей рів може бути частиною річкового русла, затопленого в посткарангатській період, тобто наприкінці останнього — вюрмського зледеніння 18–20 тис. років тому. Незважаючи на те що географічні координати виявленого в їх роботі підводного рову не наведено, можна припустити (з великою часткою впевненості), що він є глибоководним фрагментом описаного нами каналу, що з'єднується на менших глибинах з палеодельтою р. Дніпро. Більш глибоке з'ясування генезису цієї батиметричної структури вимагає проведення додаткових міждисциплінарних досліджень, які можуть пролити світло і на її екологічне значення сполучної ланки між аеробною і анаеробною зоною Чорного моря, що забезпечує, наприклад, пряме надходження на дно зваженої речовини, багаті органікою, з мілководних районів північно-західного шельфу в глибоководну товщу, стимулюючи в ній процеси бактеріальної сульфатредукції і утворення сірководню. У цьому випадку палеодельта р. Дніпро може слугувати своєрідним колектором такої суспензії, а продовжуючий її глибоководний канал — транзитним руслом. Це, можливо, відноситься і до перенесення в сірководневу зону сплячих спор і цист наземних і водневих аеробів, що можуть надходити в батіаль Чорного моря по підводних каньйонах з грязьовими зсувами і, ймовірно, — з придонними потоками зваженої речовини [14], та зберігати свою життєздатність у відновному середовищі досить тривалий час [15].

1. Ефремова А. Г., Жижченко В. Р. Обнаружение кристаллогидратов в осадках современных акваторий // Докл. АН СССР. – 1974. – **214**, № 5. – С. 1179–1181.
2. Иванов М. К., Конюхов А. И., Кульничский Л. М. и др. Грязевые вулканы в глубоководной части Черного моря // Вест. Моск. ун-та. Сер. 4. Геология. – 1989. – № 3. – С. 48–54.
3. Поликарпов Г. Г., Егоров В. М. Виявлено активні газовиділення з дна Чорного моря // Вісн. АН УРСР. – 1989. – № 10. – С. 108–111.
4. Егоров В. Н., Поликарпов Г. Г., Гулин С. Б. и др. Современные представления о средообразующей и экологической роли струйных метановых газовыделений со дна Черного моря // Мор. экол. журн. – 2003. – **2**, № 3. – С. 5–26.
5. Егоров В. Н., Артемов Ю. Г., Гулин С. Б. Метановые сипы в Черном море: средообразующая и экологическая роль / Под ред. Г. Г. Поликарпова. – Севастополь: НПЦ “ЭКОСИ-Гидрофизика”, 2011. – 405 с.
6. Иванов М. В., Поликарпов Г. Г., Леин А. Ю. и др. Биогеохимия цикла углерода в районе метановых газовыделений Черного моря // Докл. АН СССР. – 1991. – **3**, № 5. – С. 1235–1240.
7. Шнюков Е. Ф., Соболевский Ю. В., Кутный В. А. Необычные карбонатные постройки континентального склона северо-западной части Черного моря – вероятное следствие дегазации недр // Литол. и полезн. ископаемые. – 1995. – № 5. – С. 541–561.
8. Gulin S. B., Polikarpov G. G., Egorov V. N. The age of microbial carbonate structures grown at methane seeps in the Black Sea with an implication of dating of the seeping methane // Mar. Chem. – 2003. – **84**, No 1./2. – P. 67–72.
9. Gulin S. B., Greinert J., Egorov V. N. et al. Observation of microbial carbonate build-ups growing at methane seeps near the upper boundary of the gas-hydrate stability zone in the Black Sea // Мор. экол. журн. – 2005. – **4**, No 3. – С. 5–14.
10. Artemov Yu. G., Egorov V. N., Polikarpov G. G., Gulin S. B. Methane emission to the hydro- and atmosphere by gas bubble streams in the Dnieper paleo-delta, the Black Sea // Там же. – 2007. – **6**, No 3. – С. 5–26.
11. Parsons D. Undersea river discovered flowing on sea bed // The Telegraph, 19 Apr. 2011. – www.telegraph.co.uk.

12. Шнюкова Е. Е., Пасынков А. А. Магматизм как фактор рельефообразования Ломоносовского подводного массива (Континентальный склон Черного моря) // Геол. журн. – 2003. – № 1. – С. 74–79.
13. Шнюков Е. Ф. Геологические итоги рейса НИС “Ихтиандр” в Черное море // Там же. – 1993. – № 6. – С. 136–138.
14. Поликарпов Г. Г. Глубоководный полигон для изучения свойств живого вещества в экстремальных условиях // Радиационная биология. Радиоэкология. – 2011. – 51, № 5. – С. 565–575.
15. Зайцев Ю. П., Поликарпов Г. Г., Егоров В. Н. и др. Средоточие останков оксибионтов и банк живых спор высших грибов и диатомовых в донных отложениях сероводородной батиаля Черного моря // Доп. НАН України. – 2007. – № 7. – С. 159–164.

Інститут біології південних морів
ім. О. О. Ковалевського НАН України, Севастополь

Надійшло до редакції 25.04.2012

С. Б. Гулин, Ю. Г. Артемов, академик НАН України В. Н. Егоров,
академик НАН України **Г. Г. Поликарпов**, Д. Б. Евтушенко

Эколого-географический феномен: подводный канал на континентальном склоне в северо-западной части Черного моря

Батиметрические исследования, выполненные в рамках международной кооперации с использованием современного гидроакустического оборудования, позволили провести детальное обследование и впервые получить непрерывную трехмерную карту необычной структуры на дне северо-западной части Черного моря в виде протяженного (более 70 км) и глубокого (до 125 м) подводного канала (шириной более чем 1100 м), связанного с системой каньонов палеодельты р. Днепр, который проходит через весь континентальный склон до абиссальной равнины и, возможно, является дополнительным связующим звеном между аэробной и анаэробной зоной Черного моря.

S. B. Gulin, Yu. G. Artemov, Academician of the NAS of Ukraine V. N. Egorov,
Academician of the NAS of Ukraine **G. G. Polikarpov**, D. B. Evtushenko

Ecological-geographical phenomenon: the underwater channel on the continental slope in the NW part of the Black Sea

The bathymetric studies performed under international cooperation using the contemporary hydro-acoustic equipment has allowed carrying out the detailed observation and obtaining, for the first time, the continuous 3D map of an unusual structure on the floor of the north-western Black Sea area in the form of a long (more than 70 km) and deep (to 125 m) underwater channel 1100 m in width, which is connected with the system of canyons of the Dnieper River paleo-delta, runs across the entire continental slope down to the abyssal plain, and presumably is an additional link between the oxic and anoxic environments in the Black Sea.

Академик НАН Украины В. Н. Еремеев, А. Н. Жуков,
М. А. Крашенинникова, А. А. Сизов, А. Е. Чехлан

Климатическая изменчивость индекса САК и связанные с ней процессы в верхнем слое Северной Атлантики

Рассматриваются процессы формирования индекса Северо-Атлантического колебания (САК) в разные фазы вековой изменчивости солнечной активности (числа Вольфа, W). Найдено, что при аномально высоких значениях индекса САК уменьшается доля атлантических вод, поступающих в высокие широты. При аномально низких значениях индекса САК увеличивается поток атлантических вод, поступающих в высокие широты, в частности, через Фареро-Шетландский пролив в Норвежское и Баренцево моря. Выделены диапазоны изменчивости САК, регулирующие эти потоки атлантических вод.

Климатические изменения, наблюдаемые в высоких широтах Северной Атлантики в последние годы [1, 2], связываются с процессами переноса тепла в системе океанических течений [3]. В большинстве работ, содержащих результаты климатических исследований в Северной Атлантике, рассматривается роль системы течений, образующих Северный субтропический антициклонический круговорот и Субполярный циклонический круговорот [4, 5]. Эти системы течений переносят тепло в полярные районы, регулируя режим ледовитости Арктического бассейна [2, 6]. Перенос массы и тепла в моря Арктического бассейна осуществляется поверхностными и промежуточными водами субтропической Атлантики через Фареро-Шетландский и Исландско-Фарерский проливы [7]. Поступление теплых и соленых субтропических вод в высокие широты регулируется ветвями Северо-Атлантического течения, крупномасштабные флуктуации которого формируются в значительной степени западным переносом в тропосфере умеренных широт, определяемых индексом Северо-Атлантического колебания (САК) [8, 9]. В свою очередь, временная изменчивость индекса САК лежит в широких пределах от 5–6 до 60 и более лет [6, 10]. Оценки показывают, что флуктуации индекса САК формируются под воздействием возмущений, поступающих к атмосфере Земли в разные фазы солнечной активности (с. а.) [11]. Поэтому для анализа масштабов изменчивости переноса водных масс в полярный бассейн необходимо учитывать возмущения циркуляции атмосферы, формирующиеся в зависимости от четности с. а.

Цель работы — исследовать режим формирования индекса САК в разные фазы с. а. и получить оценки изменчивости дрейфовой компоненты потока североатлантических вод через Фареро-Шетландский пролив в зависимости от индекса САК.

Используемый материал и методика исследования. Для оценки влияния крупномасштабной изменчивости с. а. на формирование междесятилетних масштабов флуктуации индекса САК брались среднегодовые значения чисел Вольфа (W) (<http://www.wdcb.ru/stp/data/solar.act/sunspot/>) за 1868–2005 гг. и средние за декабрь–март значения САК (<http://www.cgd.ucar.edu/-cas/catalog/climind/>) за 1868–2010 гг. Проводилось осреднение исходных рядов по 11-летним циклам с. а. Построенные по осредненным величинам графики аппроксимировались полиномами пятой степени и оценивалась точность аппроксимации (R^2).

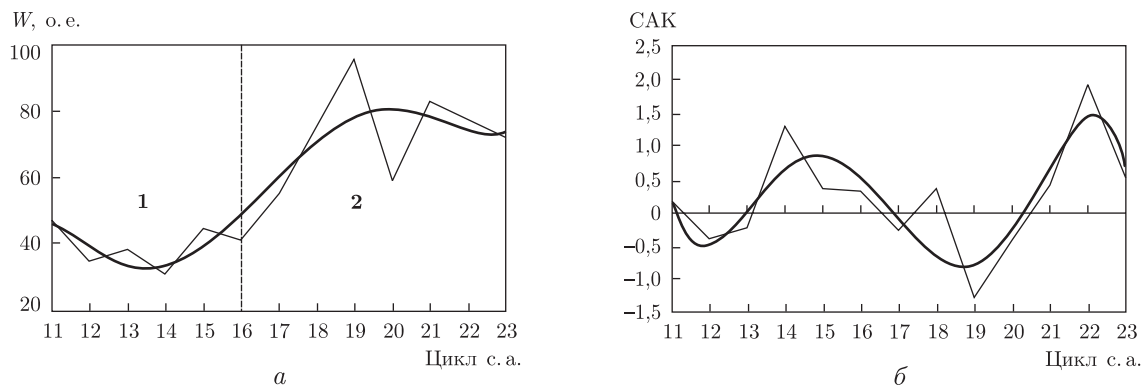


Рис. 1. Осредненные по 11-летним циклам значения W (а) и САК (б), аппроксимированные полиномом 5-й степени.

Штриховой вертикальной линией на рис. а выделены два временных интервала изменчивости числа W

Исследование изменчивости потока вод через Фареро-Шетландский пролив в разные фазы индекса САК проводилось по материалам, взятым из публикации [7]. Температура в верхнем 200-метровом слое воды на Кольском меридиане и процент свободной от льда поверхности Баренцева моря были взяты из работы [12]. Для оценки значимости полученных результатов применялись стандартные процедуры.

Результаты и их обсуждение. Для решения поставленной задачи оценим прежде всего характер изменчивости индекса САК в разные фазы векового цикла с. а. Используем ряды данных по числам W и САК с 1868 по 2005 гг. Сглаженные полиномиальным фильтром кривые W и САК иллюстрирует рис. 1. Точность аппроксимации кривых на рисунке полиномом 5-й степени (R^2) лежит в пределах от заметной (0,68 для САК) до высокой (0,80 для W).

На рис. 1, а выделим два временных интервала изменчивости чисел W : интервал малых значений с 11 по 16 циклы (1868–1933 гг.) и интервал больших значений с 17 по 23 циклы (1934–2005 гг.). Присвоим выделенным интервалам цифровые обозначения **1** и **2** соответственно. Оценим средние величины индекса САК в обоих интервалах. В интервале **1**: $W = 39,3$; САК = 0,2; В интервале **2**: $W = 73,4$; САК = 0,15.

В группе лет с низкими значениями W индекс САК был максимальным, а в группе лет с высокими значениями W — минимальным. Величины САК в обоих интервалах изменяются в небольших пределах: в интервале **1** — САК примерно в 1,7 раза был выше, чем в интервале **2**, но и в этом случае САК не выходил за пределы значений 0,5.

Выберем из всего ряда инструментальных наблюдений индекса САК (1868–2010 гг.) значения, попадающие в три условные градации, определяемые следующим образом: $-0,5 \leq \leq \text{САК} \leq 0,5$; $\text{САК} \geq 1$ и $\text{САК} \leq -1$; найдем отношение числа случаев попадания САК в эти градации к общему числу случаев, т. е. определим частоту попадания САК в каждую из выделенных градаций. Сделав это отдельно для четного и нечетного циклов а. с., убеждаемся, что частота появления величин САК, лежащих в интервале $\pm 0,5$, практически одинакова как в четный (0,14), так и в нечетный (0,12) циклы с. а. Это дает основание предположить, что диапазон $-0,5 \leq \leq \text{САК} \leq 0,5$ характеризует климатические значения индекса САК. С другой стороны, в четные циклы случаи с $\text{САК} \geq 1$ наблюдаются в два раза чаще, чем случаи с $\text{САК} \leq -1$ (соответственно 0,24 и 0,12), а в нечетные циклы эти экстремальные значения индекса САК равновероятны (соответственно 0,19 и 0,18). Следо-

вательно, в годы четного цикла с. а. над Северной Атлантикой чаще интенсифицируется зональный (западный) перенос в нижней тропосфере, что должно усиливать перенос водных масс в северной ветви субтропического антициклонического круговорота, представленного Северо-Атлантическим течением (САТ). Усиление переноса водных масс в северной ветви субтропического круговорота сопровождается усилением пассатного переноса и, следовательно, интенсификацией всего субтропического антициклонического круговорота вод. Это следует из известных результатов [13], показывающих синхронизацию изменчивости САК и градиента приземного давления между Азорским максимумом и тропической ложбиной. Интенсификация переноса водных масс в субтропическом круговороте, согласно гипотезе Айселина [14], должна сопровождаться уменьшением его поперечных размеров. Предполагается, что этот процесс приводит к уменьшению доли теплых и соленых вод, поступающих с САТ в высокие широты. В случае ослабления циркуляции в субтропическом круговороте, сопровождающееся, согласно данной гипотезы увеличением его размеров, предполагается, что в высокие широты должно возрасть поступление теплых и соленых вод.

Справедливость этого предположения подтверждается работами последних лет. При высоких значениях индекса САК субтропический круговорот интенсифицируется [5], при этом наблюдается заглубливание термоклина в нем [4], верхний 300-метровый слой субтропического круговорота “разогревается” и “осолоняется” [1], а сам круговорот сдвигается на юго-восток [3]. При низких значениях индекса САК эти процессы развиваются в противоположном направлении.

По данным альтиметрических наблюдений и геострофических расчетов [15] в десятилетие 1993–2003 гг., когда индекс САК характеризовался отрицательным трендом, в субтропической Атлантике западнее Срединно-Атлантического хребта, т. е. в центре субтропического круговорота наблюдалась тенденция к уменьшению уровня моря. В то же время в восточной части субтропического круговорота (от побережья Европы до примерно 20° з. д.) отмечался рост уровня моря. Наблюдающийся в этом районе стрежень Азорского течения (элемент восточной части субтропического круговорота) сдвигался на север. Таким образом, при интенсификации субтропического круговорота в годы с высоким индексом САК, когда уровень моря в его центре повышался, стрежень Азорского течения смещался на юг. При ослаблении субтропического круговорота при низких значениях индекса САК стрежень Азорского течения, т. е. восточная ветвь субтропического круговорота, смещался на север.

Синхронность процесса интенсификации (ослабления) циркуляции в субтропическом и субполярном круговоротах [2, 5] создает условия, при которых при положительной фазе САК субполярный фронт и ось САТ сдвигаются на юг [2, 9], а субарктические воды распространяются на весь Исландский бассейн. При отрицательной фазе САК субполярный фронт и ось САТ сдвигаются на север [9], субарктические воды отступают к западу и на север проникают субтропические воды [2].

Используя данные по переносу атлантических вод в полярный бассейн через Фареро-Шетландский пролив [6, 12], было показано, как этот процесс изменяется в разные фазы САК. Ряд с 1900 по 1979 гг. позволял оценить изменчивость потока вод в проливе как в **1**, так и во **2** временных интервалах. Чтобы рассмотреть колебание расхода водных масс (Q , S_v) в проливе ($1 S_v = 10^6 \text{ м}^3/\text{с}$) в зависимости от САК в годы четного и нечетного циклов с. а., поступим следующим образом. Выберем из массива данных по расходу водных масс в проливе значения, попадающие в выбранные градации Q . В данном случае каждая градация включала в себя значения Q через 0,4 S_v , в диапазоне от 2 до 4,3 S_v (диапазон

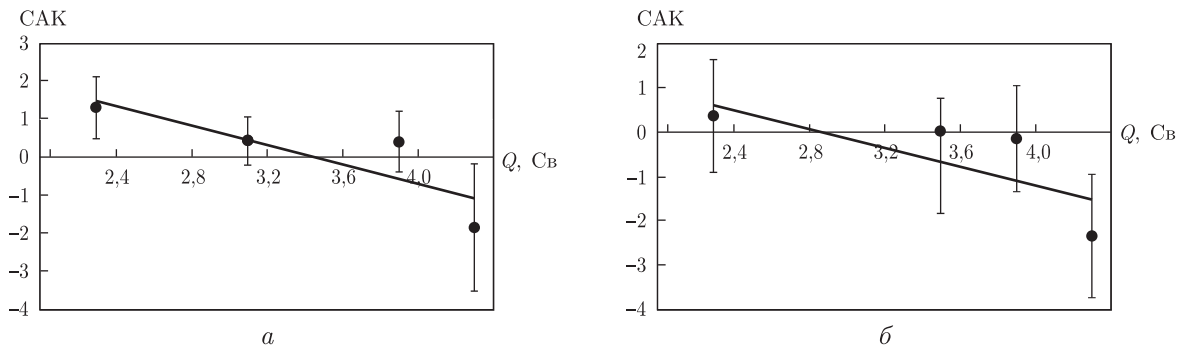


Рис. 2. Зависимость потока атлантических вод ($Q \cdot 10^6 \text{ м}^3/\text{с}$) в Фареро-Шетландском проливе от индекса САК в четные (а) и нечетные (б) циклы с. а.

изменчивости расхода вод в Фареро-Шетландском проливе) было получено шесть таких градаций. Для каждой градации определялось соответствующее среднее значение индекса САК. Полученные таким образом данные представлены на рис. 2. Заметим, что отсутствие точек на рис. 2, а в градациях 2,4–2,7 и 3,2–3,5 Св и на рис. 2, б в градациях 2,4–2,7 и 2,8–3,1 Св соответственно в четном и нечетном циклах объясняется недостаточным количеством данных, что не позволяло оценить значимые величины потока и соответствующие им значения индекса САК в этих градациях. Вертикальные кривые у точек на графике — значения $2\sigma/\sqrt{n}$.

Как следует из рис. 2: с увеличением САК уменьшается поток вод через пролив, а с уменьшением САК — увеличивается. В то же время из рисунка видно, что существует диапазон изменчивости индекса САК, лежащий в пределах $\pm 0,5$, при котором осуществляется средний, назовем его условно — климатический перенос водных масс через Фареро-Шетландский пролив. Грубая оценка этого переноса по графикам а и б лежит в пределах 3–4 Св. Отрицательные тренды переноса в зависимости от индекса САК иллюстрирует рис. 2.

Материалы, содержащиеся в публикации [12], позволяют продемонстрировать следующее: поток вод через Фареро-Шетландский пролив значимо коррелирован (на уровне 95%) с изменением средней по Кольскому меридиану температуры в слое 0–200 м (коэффициент корреляции при нулевом сдвиге равен 0,51). Колебание объема поступления теплых атлантических вод в северные моря при экстремальных положительных и отрицательных значениях индекса САК проявляется в соответствующем колебании их ледовитости. Оценки по материалам, взятым из [12], показывают, что при интенсификации потока вод через Фареро-Шетландский пролив уменьшается ледовитость Баренцева моря (коэффициент корреляции равен $-0,57$). Эти материалы позволяют показать, как свободная ото льда поверхность моря представляется при разных градациях индекса САК.

Несколько изменив градации САК (для увеличения числа членов ряда в каждой градации), получим, что при САК = $\pm 0,7$ свободная ото льда поверхность Баренцева моря близка к средней многолетней величине ($-0,06\%$ поверхности моря). При значениях САК $\geq 0,8$ (аномально низком притоке теплых атлантических вод) свободная ото льда поверхность моря сокращается до $-0,85\%$, а при значениях САК $\leq -0,8$ (аномально высоком притоке атлантических вод) — увеличивается до 1% поверхности моря. Таким образом, аномально низкие значения САК создают условия, способствующие аномальному потеплению верхнего слоя Баренцева моря в зоне действия Норвежского (Нордкапского) течений. Увеличение массы теплой атлантической воды, поступающей с этими течениями в Арктический бассейн,

должно, по-видимому, увеличивать вынос холодных арктических вод через пролив Фрама. Косвенным подтверждением такого процесса могут служить результаты исследований [6], где показано, что вынос льда через пролив Фрама увеличивался в нечетные циклы с. а. (когда преобладали минимальные значения индекса САК) и уменьшался в четные циклы (когда преобладали высокие значения индекса САК).

Все приведенные результаты подтверждают высказанное выше предположение об уменьшении доли теплых атлантических вод, поступающих через Фареро-Шетландский пролив в Норвежское и Баренцево моря при аномально высоких значениях индекса САК, и наоборот, о возрастании доли теплых атлантических вод, поступающих через Фареро-Шетландский пролив в арктический бассейн при аномально низких значениях индекса САК.

Таким образом, предложенная в работе схема изменения переноса атлантических водных масс в Арктический бассейн, основанная на предположении об изменении интенсивности циркуляции субтропического круговорота в зависимости от циркуляции атмосферы над Северной Атлантикой (индекса САК), подтверждается результатами наблюдений. Экспериментальные данные позволяют выделить три диапазона изменчивости индекса САК, при которых происходит существенная перестройка переноса атлантических вод в высокие широты. Все три диапазона изменчивости САК формируются под воздействием возмущений барического поля атмосферы, крупномасштабные флуктуации которого связаны с вариациями с. а. на масштабах векового и 11-летнего (четного и нечетного) циклов.

Выделенные диапазоны изменчивости индекса САК позволили оценить величины переноса атлантических вод через Фареро-Шетландский пролив и выявить соответствующий этому переносу режим формирования температурного поля в южной части Баренцева моря. Реалистичность этого процесса подтверждается данными по ледовитости Баренцева моря и по оценкам выноса арктического льда через пролив Фрама [6].

1. Polyakov I. V., Bhatt U. S., Simmons H. L. et al. Multidecadal variability of the North Atlantic temperature and salinity during the twentieth century // *J. Climate*. – 2005. – **18**, No 21. – P. 4562–4581.
2. Bersh M., Yashayev I., Koltermann K. P. Recent changes of the thermohaline circulation in the subpolar North Atlantic // *Ocean Dynamics*. – 2007. – **57**. – P. 223–235.
3. Полонский А. Б., Крашенинникова С. Б. Пространственно-временная изменчивость меридиональных переносов тепла в Северной Атлантике // *Мор. гидрофиз. журн.* – 2010. – № 6. – С. 24–41.
4. Gray S. M., Haines K., Troccoli A. A Study of Temperature Changes in the Upper North Atlantic: 1950. – 1994. – // *J. Climate*. – 2000. – **13**, No 15. – P. 2697–2711.
5. Curry R. G., McCartney M. S. Ocean Gyre Circulation Changes Associated with the North Atlantic Oscillation // *J. Phys. Oceanogr.* – 2001. – **31**, No 12. – P. 3374–3400.
6. Фролов И. Е., Гудкович З. М., Карклин В. П. и др. Научные исследования в Арктике. Т. 2. Климатические изменения ледяного покрова морей евразийского шельфа. – Санкт-Петербург: Наука, 2007. – 135 с.
7. Структура и изменчивость крупномасштабных океанических процессов и полей в Норвежской энергоактивной зоне / Под ред. Ю. В. Николаева, Г. В. Алексева. – Ленинград: Гидрометеоздат, 1989. – 128 с.
8. Hurrell J. W. Decadal trends in the North Atlantic Oscillation: Regional temperatures and precipitation // *Science*. – 1995. – **269**, No 5224. – P. 676–679.
9. Сарафанов А. А. Механизм воздействия североатлантического колебания на температуру и соленость промежуточных и глубинных вод субполярной северной Атлантики // *Метеорология и гидрология*. – 2009. – № 3. – С. 65–73.
10. Еремеев В. Н., Жуков А. Н., Крашенинникова М. А. и др. Волновые процессы в изменчивости поверхностной температуры Черного моря // *Докл. РАН*. – 2012. – **443**, № 1. – С. 112–115.
11. Витинский Ю. В. Солнечная активность. – Москва: Наука, 1983. – 192 с.
12. Klyashtorin L. B., Borisov V., Lyubushin A. Cyclic change of climate and major commercial stocks of the Barents Sea // *Mar. Biol. Res.* – 2009. – No 5. – P. 4–17.

13. Ефимов В. В., Сизов А. А., Юровский А. В. О взаимосвязанности атмосферных и океанических термодинамических полей в Северной Атлантике // Метеорология и гидрология. – 1991. – № 6. – С. 55–66.
14. Стоммел Г. Гольфстрим. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1962. – 227 с.
15. Volkov D. L., Van Aken H. M. Climate-related change of sea level in the extratropical North Atlantic and North Pacific in 1993–2003 // Geophys. Res. Lett. – 2005. – **32**. – L14611 – L14615.

Океанологический центр НАН Украины, Севастополь
Морской гидрофизический институт
НАН Украины, Севастополь

Поступило в редакцию 06.02.2012

Академік НАН України В. М. Еремєєв, О. М. Жуков, М. А. Крашеніннікова,
А. О. Сізов, А. Ю. Чехлан

Кліматична мінливість індексу ПАК і пов'язані з нею процеси у верхньому шарі Північної Атлантики

Розглядаються процеси формування індексу Північно-Атлантичного колювання (ПАК) в різні фази вікової мінливості сонячної активності (числа Вольфа, W). Знайдено, що при аномально високим значенням індексу ПАК зменшується частка атлантичних вод, які надходять у високі широти. При аномально низьким значенням індексу ПАК збільшується потік атлантичних вод, які надходять у високі широти, зокрема, через Фареро-Шетландську протоку в Норвезьке та Баренцево моря. Виділено діапазони мінливості ПАК, що регулюють ці потоки.

Academician of the NAS of Ukraine V. N. Eremeev, A. N. Zhukov,
M. A. Krasheninnikova, A. A. Sizov, A. E. Chekhlan

Climatic variability of the NAO index and related processes in the upper layer of the North Atlantic

The processes of formation of the North Atlantic oscillation (NAO) index in different phases of secular variability of the solar activity are considered (Wolf numbers, W). At anomalous high values of NAO, the part of the Atlantic waters flowing into high latitudes decreases. At anomalous low values of NAO, the part of the Atlantic waters flowing into high latitudes increases, in particular, through the Faroe-Shetland Channel to the Norwegian and Barents seas. The range of NAO variation controlling these flows is separated.

С. П. Левашов, член-корреспондент НАН Украины **Н. А. Якимчук**,
И. Н. Корчагин, **А. И. Самсонов**, **Д. Н. Божежа**

Новые данные о перспективах нефтегазоносности шельфа Черного моря в районе расположения структур Субботина и Палласа

Представлены новые результаты оценки перспектив нефтегазоносности мелководной части Причерченского шельфа и структуры Палласа, полученные с использованием оригинальной технологии частотно-резонансной обработки и интерпретации данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ) с целью “прямых” поисков и разведки месторождений углеводородов, рудных полезных ископаемых, водоносных коллекторов. В результате проведенных экспериментальных исследований получен значительный объем новой (дополнительной) и независимой информации об указанных выше перспективах. В комплексе с имеющимися геолого-геофизическими материалами эту информацию можно использовать для выбора объектов первоочередного детального изучения и разбуривания. С помощью технологии частотно-резонансной обработки и дешифрирования данных ДЗЗ может быть выполнена оперативная оценка перспектив нефтегазоносности всех участков и структур в украинских секторах Черного и Азовского морей. Закартированные аномальные зоны сопоставляются с аномалиями над месторождениями “Белый Тигр” и “Дракон” на шельфе Вьетнама.

В последнее время в мире интенсифицировались геолого-геофизические работы с целью поисков и разведки скоплений углеводородов (УВ) на шельфе и в глубоководных областях внутренних морей и Мирового океана. Для Украины одним из наиболее перспективных нефтегазоносных регионов являются украинские секторы Азовского и Черного морей, в пределах которых уже открыто 17 месторождений УВ (13 газовых, 3 газоконденсатных, 1 нефтяное) [1]. Объем поисковых и разведочных работ в акваториях этого региона планируется в ближайшей перспективе существенным образом увеличить.

Однако не секрет, что материальные, финансовые и временные затраты на поиски, разведку и добычу нефти и газа в акваториях морей и океанов существенно возрастают по сравнению с аналогичными работами на суше. Еще более крупные ресурсы необходимы на освоение арктических и антарктических регионов. В связи с этим проблема интенсификации, ускорения и оптимизации геологоразведочного процесса поисков и разведки месторождений нефти, газа, газогидратов в морских акваториях является весьма актуальной.

В этом плане на начальных этапах поисковых работ определенную помощь в повышении эффективности разведочного процесса в целом могут оказать мобильные и оперативные геофизические технологии и, в первую очередь, технологии и методы, базирующиеся на обработке и интерпретации (дешифрировании) данных дистанционного зондирования Земли (ДЗЗ), которые активно применяются для решения поисковых, экологических и мониторинговых задач. Обработка и дешифрирование данных ДЗЗ позволяет оперативно, в сжатые сроки выделять в пределах изучаемой территории наиболее перспективные участки существенно ограниченного размера для детального обследования традиционными геофизическими методами. Одна из технологий дистанционного опознания перспективных территорий описана в статье [2].

В 2010 г. авторы также начали целенаправленную апробацию нового метода частотно-резонансной обработки и интерпретации (дешифрирования) данных ДЗЗ с целью “прямых” поисков горючих и рудных полезных ископаемых [3–6]. Апробация этого метода засвидетельствовала о возможности существенного ускорения геологоразведочного процесса на нефть и газ при его применении. На начальном этапе апробации метода его потенциальные возможности и разрешающая способность изучались на известных месторождениях нефти и газа в различных регионах мира. Полученные на данном этапе результаты продемонстрировали его работоспособность и целесообразность практического использования в геологоразведочном процессе на нефть и газ, а также рудные полезные ископаемые [3–7]. На последующей стадии апробации технологии начали отрабатывать более детально методические особенности ее применения при проведении поисковых работ как на рудные, так и горючие полезные ископаемые [4–6]. Ниже приводятся некоторые результаты выполненных экспериментальных исследований — анализируются методические аспекты и особенности применения этой мобильной технологии при поисках скоплений УВ в морских акваториях.

Апробация мобильных геофизических технологий. Уже более десяти лет авторы работают над продвижением в практику инновационных технологий геофизических исследований (в том числе “прямых” поисков и разведки скоплений УВ, рудных полезных ископаемых, воды). Компонентами одной из таких технологий являются геоэлектрические методы становления короткоимпульсного электромагнитного поля (СКИП) и вертикального электрорезонансного зондирования (ВЭРЗ) (экспресс-технология СКИП–ВЭРЗ) [8, 9]. Практическое применение как технологии в целом, так и отдельных ее методов дает возможность оперативно и с приемлемыми финансовыми затратами получать новую (или же дополнительную), но главное — *независимую информацию* о перспективах нефтегазоносности, рудоносности и водоносности изучаемых объектов, площадей и месторождений. Возможность проведения площадной съемки методом СКИП в движении (с автомобиля и/или летательного аппарата) позволяет оперативно обследовать поисковые площади крупных размеров в сжатые сроки. Примеры практического применения технологии СКИП–ВЭРЗ при поисках УВ в различных регионах приведены в работах [8, 9]. Апробирована также методика проведения поисковых работ с использованием этих методов в морских акваториях [10]. В 2009–2011 гг. технология СКИП–ВЭРЗ прошла апробацию на пяти лицензионных площадях в районе крупного Ванкорского нефтегазового месторождения (Красноярский край, РФ), материалы выполненных работ на трех участках детально анализируются в [11], здесь же рекомендуется включить методику в комплекс геофизических методов при поисках и разведке залежей УВ.

На протяжении всего периода практического применения методов СКИП и ВЭРЗ авторы стремились повысить эффективность (и, в первую очередь, оперативность) решения конкретных практических задач с их помощью как за счет совершенствования методических и технических особенностей технологии СКИП–ВЭРЗ непосредственно, так и путем комплексирования этих методов с другими геофизическими методами (в том числе и с нетрадиционными). В последнее время в этом направлении активно изучаются перспективы расширения практических возможностей технологии СКИП–ВЭРЗ за счет включения в ее состав нового метода частотно-резонансной обработки и интерпретации (дешифрирования) данных ДЗЗ. Метод позволяет обнаруживать и картировать аномальные зоны типа залежь нефти, залежь газа, залежь газогидратов, золоторудная залежь, водоносная залежь и т. д. На данный момент метод частотно-резонансной обработки результатов ДЗЗ уже прошел

апробацию на более чем 70 участках и площадях (как нефтегазоносных, так и рудных). Приведенные в работах [3–7] материалы апробации свидетельствуют о том, что технология позволяет оперативно обнаруживать и картировать аномальные зоны типа залежь нефти и/или залежь газа, которые обусловлены крупными и средними месторождениями УВ. В публикации [3] также показано, что при обработке и интерпретации данных ДЗЗ крупного масштаба (1 : 10000 и крупнее) и разрешения могут быть обнаружены и закартированы объекты небольших размеров (100–300 м).

В рамках технологии частотно-резонансной обработки полученных результатов ДЗЗ разработана и начала апробироваться дополнительная методика предварительной оценки пластовых давлений в нефтегазовых коллекторах [4]. Выявление в пределах закартированных аномалий типа залежь аномально поляризованных пластов (АПП) типа нефть, газ, газоконденсат с повышенными пластовыми давлениями существенно повышает вероятность получения притоков флюидов (в том числе и в промышленных объемах).

Авторы также активно проводили апробацию мобильных геоэлектрических методов и технологии частотно-резонансной обработки данных ДЗЗ в морских акваториях в различных регионах земного шара. Ниже приводятся и анализируются результаты частотно-резонансной обработки данных ДЗЗ, в том числе и с использованием методики оценки средних значений пластовых давлений флюидов, в районе Прикерченского шельфа и структуры Палласа.

Картирование аномалий типа залежь. На начальном этапе апробации указанной технологии проведена предварительная оценка перспектив нефтегазоносности двух регионов Украины — Прикерченского шельфа Черного моря (мелководная часть) и северной части шельфа Азовского моря. Обработка данных ДЗЗ в пределах расположения структуры Палласа на первоначальном этапе не проводилась. Полученные в этот период работ результаты опубликованы в [7].

На указанном этапе работ в пределах Прикерченского шельфа по результатам обработки и дешифрирования данных ДЗЗ обнаружено и закартировано семь аномалий типа залежь, в том числе и над известной структурой (нефтегазовым месторождением) Субботина (см. рис. 1 в [7]). Слева и справа от структуры Субботина также зафиксированы аномальные зоны типа нефть + газ и оставшиеся аномальные зоны — типа газ. Аномальная зона в пределах структуры Субботина практически полностью ее покрывает. К северо-западу от этой аномалии расположена аномальная зона с максимальными значениями аномального отклика в пределах обследованной площади.

Оценка значений пластового давления. Определенный методический и практический интерес представляло для авторов проведение обработки данных ДЗЗ с использованием методики оценки средних значений пластового давления в пределах обнаруженных и закартированных аномалий типа залежь УВ на Прикерченском шельфе (в том числе и на структуре Субботина). Эта проблема стала актуальной вдвойне в связи с планируемым детальным изучением (и освоением) потенциала структуры Палласа.

Данные ДЗЗ этого района в ноябре 2011 г. были обработаны повторно с применением методики оценки средних пластовых давлений [4]. При этом область обследования была расширена — к ней добавлен участок акватории, на котором расположена структура Палласа.

Из-за увеличения площади обследования уменьшился масштаб обработки — до 1 : 300 000 (на начальном этапе использовался масштаб 1 : 200 000). В процессе проведения обработки более пристальное внимание уделялось тем участкам обследования, где были обнаруже-

ны аномалии типа залежь УВ на первом этапе дешифрирования данных ДЗЗ. Полученные результаты представлены на рис. 1. Как следует из рисунка, во всех обнаруженных и закартированных ранее аномальных зонах типа залежь УВ выделены участки с повышенными значениями среднего пластового давления. Как и ранее, над структурными зонами Керченская, Морская (Моряна), Глубокая, Союзная, Кавказская и Дрейфовая аномалии типа залежь УВ не зафиксированы. Зона с повышенными значениями пластового давления обнаружена также в пределах аномалии типа залежь УВ, расположенной восточнее структуры Кавказская (аномальная зона Безымянная).

Представленные на рис. 1 материалы обработки данных ДЗЗ позволяют сделать вывод о том, что дальнейшие поисковые работы первоочередного характера целесообразно проводить в пределах структур Южнокерченская, Абиха, Лычагина и аномальной зоны Безымянная.

Обработка данных ДЗЗ в районе структуры Субботина. Практический опыт применения технологии обработки и интерпретации данных ДЗЗ показал, что при дешифрировании материалов ДЗЗ более крупного масштаба в некоторых случаях площадь выделяемых и картируемых аномалий типа газ, нефть, золото и т. д. уменьшается. Вполне закономерно также возник практический интерес изучить эту особенность технологии на материалах обследуемого участка.

В качестве объекта более детального обследования (в масштабе 1 : 50 000) была взята наиболее изученная структура (месторождение) Субботина. Отличительная особенность этой структуры — наличие трех пробуренных скважин. Сведения о геологическом строении структуры Субботина приводятся в монографии [1]. Результаты дешифрирования данных ДЗЗ масштаба 1 : 50 000 в районе расположения структуры Субботина представлены на рис. 2.

В целом на обработанном фрагменте выделена достаточно крупная аномальная зона в районе центральной части структуры Субботина и еще три небольшие по площади аномальные зоны: одна севернее Центральной и две южнее. Общая площадь аномальной зоны (по изолинии с нулевым значением) — 10,3 км².

Учитывая, что скважина № 2, в которой не установлены продуктивные горизонты в отложениях майкопа, находится за пределами изолинии 30 МПа, то следующие скважины целесообразно размещать в пределах площади, которую оконтуривает эта изолиния. Площадь аномальной зоны по этой изолинии составляет 4,95 км².

Акцентируем также внимание и на то обстоятельство, что при детализации закартированной аномальной зоны геоэлектрическими методами СКИП и ВЭРЗ с борта судна общая площадь перспективной для бурения части аномалии может уменьшиться. Во всяком случае, при проведении заверочных работ наземными методами СКИП и ВЭРЗ такие ситуации наблюдались неоднократно.

Детальные исследования в районе структуры Палласа. Данные ДЗЗ в районе структуры Палласа также обработаны дополнительно в более крупном масштабе — 1 : 100 000 (рис. 3). В этом масштабе в область обследования попадает вся структура Палласа, выделенная по сейсмическим данным. В результате в пределах самой структуры непосредственно выделено и закартировано три аномальных зоны типа залежь УВ различного размера и интенсивности: Западная, Центральная и Восточная. Площадь Западной аномальной зоны — 12,3 км² (изолиния 0), 4,6 км² (изолиния 20), 0,0 км² (изолиния 30); Центральной — 95,9 км² (изолиния 0), 62,2 км² (изолиния 20), 43,3 км² (изолиния 30); Восточной — 14,8 км² (изолиния 0), 5,55 км² (изолиния 20), 2,35 км² (изолиния 30).

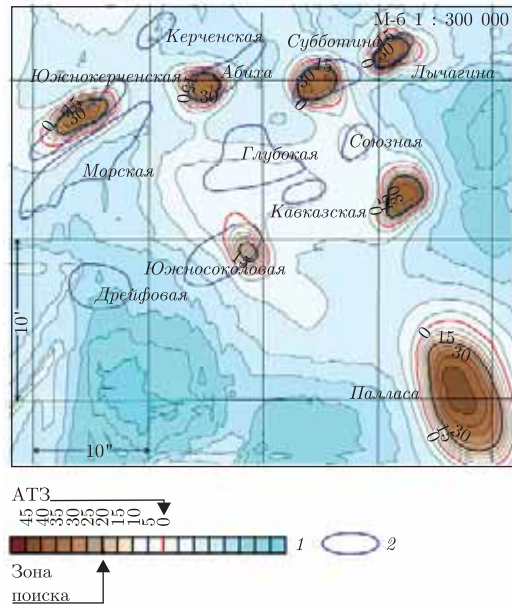


Рис. 1. Карта аномальных зон типа нефтегазовая залежь в пределах мелководной части Прикерченского шельфа и структуры Палласа (по результатам дешифрирования данных ДЗЗ):
 1 — шкала интенсивности аномального отклика (в средних значениях пластового давления, МПа);
 2 — контуры известных структур (по сейсмическим данным)

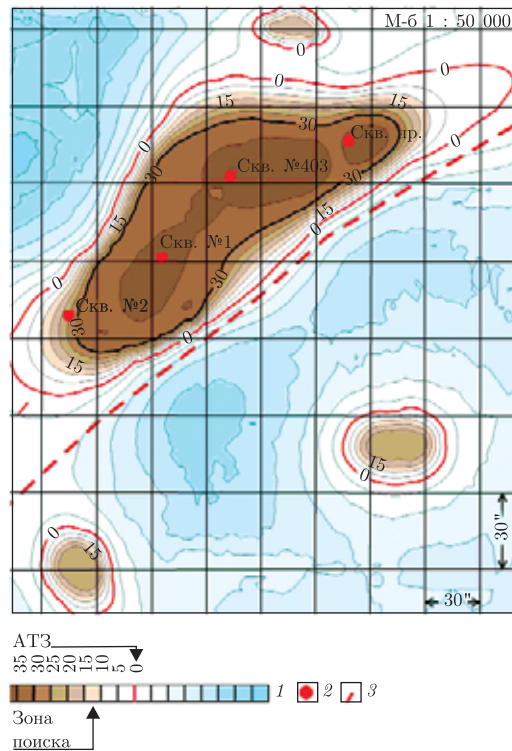


Рис. 2. Карта аномальных зон типа нефтегазовая залежь в районе структуры Субботина (по результатам дешифрирования данных ДЗЗ):
 1 — шкала интенсивности аномального отклика (в средних значениях пластового давления, МПа);
 2 — скважины; 3 — зоны тектонических нарушений (по данным дешифрирования)

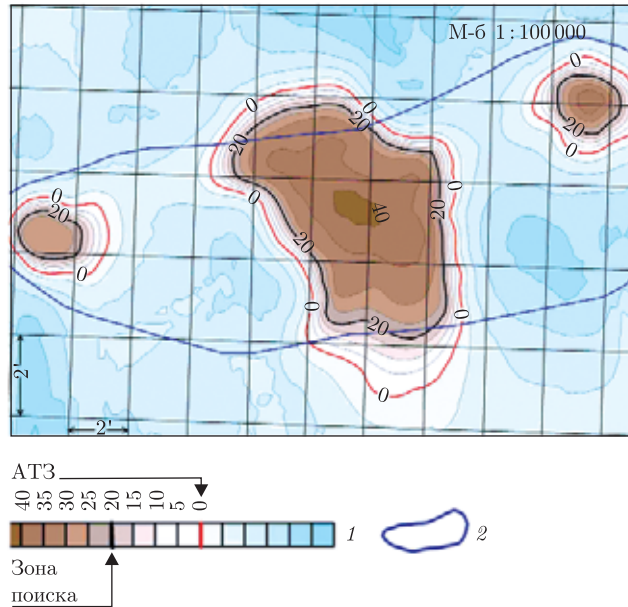


Рис. 3. Карта аномальных зон типа нефтегазовая залежь в пределах структуры Палласа (по результатам дешифрирования данных ДЗЗ):
 1 — шкала интенсивности аномального отклика (в средних значениях пластового давления, МПа);
 2 — контуры структуры Палласа (по карте месторождений и структур Южного нефтегазоносного региона Украины, ЛО УкрГГРИ, на 01.01.2004)

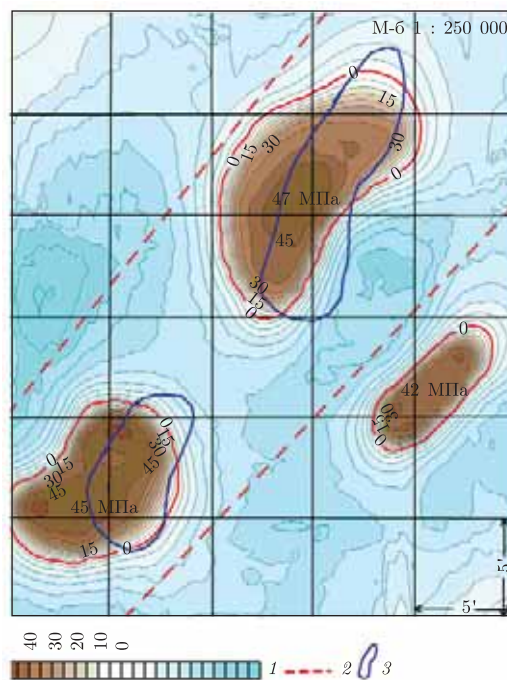


Рис. 4. Карта аномальных зон типа нефтяная залежь района расположения нефтяных месторождений “Белый Тигр” и “Дракон” на шельфе Вьетнама (по результатам обработки и дешифрирования данных ДЗЗ):
 1 — шкала интенсивности аномального отклика (в максимальных значениях пластового давления, МПа); 2 — тектонические нарушения (по результатам обработки данных ДЗЗ); 3 — приближенные контуры структур, скопированные из опубликованных источников

С учетом полученных данных на структуре Субботина (см. рис. 2) можно сделать вывод, что наиболее перспективные участки для детального изучения и бурения расположены в пределах изолинии 30.

Сопоставление результатов обработки данных ДЗЗ с геолого-геофизическими материалами. Следует отметить, что на начальном этапе авторы обратили внимание на то, что простирание основной (Центральной) аномальной зоны, практически перпендикулярное простиранию структуры Палласа (см. рис. 1, 3). Однако сопоставление закартированных аномальных зон со схемой разломной тектоники консолидированной коры в работе [12] в определенной степени прояснило ситуацию. Оказалось, что закартированная аномальная зона расположена практически параллельно линейной зоне газовых сипов, обнаруженных морскими геолого-геофизическими исследованиями. Скорее всего, эта зона сипов трассирует местоположение субмеридионального разлома. В связи с этим можно предположить, что наличие сипов может свидетельствовать о существенном разрушении покрывки в этой части структуры, а следовательно, и невозможности формирования относительно крупной залежи газа в районе их расположения.

Сопоставление аномальных зон на Прикерченском и Вьетнамском шельфах. Для более объективной оценки полученных результатов дополнительно выполнена обработка данных ДЗЗ района расположения известных месторождений нефти и газа “Белый Тигр” и “Дракон” на шельфе Вьетнама (рис. 4). В районе обследования выделены и закартированы аномальные зоны следующих размеров: “Белый Тигр” — нулевая (красная) изолиния — 234,9 км², изолиния 30 МПа — 136,04 км²; “Дракон” — нулевая (красная) изолиния — 158,06 км², изолиния 30 МПа — 101,49 км²; “Восточная” — нулевая (красная) изолиния — 65,76 км², изолиния 30 МПа — 36,38 км².

Таким образом, представленные выше материалы, а также опубликованные результаты экспериментальной апробации технологии частотно-резонансной обработки данных ДЗЗ [3–7] позволяют констатировать следующее.

1. В результате проведенных экспериментальных исследований **получен значительный объем новой (дополнительной) и независимой информации о перспективах нефтегазоносности мелководной части Прикерченского шельфа и структуры Палласа.** Эта информация в комплексе с имеющимися геолого-геофизическими материалами **может быть использована для выбора объектов первоочередного детального изучения и разбуривания.**

2. Полученные практические результаты в целом наглядно и в достаточной степени убедительно демонстрируют работоспособность мобильной технологии частотно-резонансной обработки и интерпретации (дешифрирования) данных ДЗЗ в морских акваториях.

3. Учитывая, что технология позволяет оперативно получать оценки перспектив нефтегазоносности обследуемых участков и крупных площадей, ее практическое применение может существенным образом ускорить и оптимизировать геологоразведочный процесс на нефть и газ как на суше, так и в морских акваториях.

Дополнительно в пределах отдельных структур и аномалий могут быть выполнены следующие работы:

обработка спутниковых данных более крупного масштаба и разрешения, что позволит еще более уверенно локализовать участки для оптимального расположения поисковых и разведочных скважин;

проведение исследований геоэлектрическими методами СКИП и ВЭРЗ с борта судна. Съемка СКИП дает возможность уточнить контуры наиболее перспективных аномальных

зон. Зондирование ВЭРЗ позволяет установить (оценить) глубины и мощности аномально поляризованных пластов типа газ и нефть. Такого рода работы с борта судна позволяют получить необходимые параметры залежей для предварительной оценки запасов УВ в пределах обнаруженных и закартированных аномальных зон типа залежь [10].

Следует отметить, что с помощью технологии частотно-резонансной обработки и дешифрирования данных ДЗЗ может быть выполнена оперативная оценка перспектив нефтегазоносности всех участков и структур в украинских секторах Черного и Азовского морей.

1. *Гожик П. Ф., Багрій І. Д., Войцицький З. Я., Гладун В. В., Маслун Н. В., Знаменська Т. О., Аксьом С. Д., Клошина Г. В., Іванік О. М., Клочко В. П., Мельничук П. М., Палій В. М., Цьоха О. Г.* Геолого-структурно-термоатмогеохімічне обґрунтування нафтогазоносності Азово-Чорноморської акваторії. – Київ: Логос, 2010. – 419 с.
2. *Ковалев Н. И., Гох В. А., Иващенко П. Н., Солдатова С. В.* Опыт практического использования аппаратуры комплекса “Поиск” для обнаружения и оконтуривания углеводородных месторождений // *Геоинформатика*. – 2010. – № 4. – С. 46–51.
3. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* Новые возможности оперативной оценки перспектив нефтегазоносности разведочных площадей, труднодоступных и удаленных территорий, лицензионных блоков // *Там же*. – 2010. – № 3. – С. 22–43.
4. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* Оценка относительных значений пластового давления флюидов в коллекторах: результаты проведенных экспериментов и перспективы практического применения // *Там же*. – 2011. – № 2. – С. 19–35.
5. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* Возможности мобильных геофизических технологий при поисках и разведке скоплений метана в угольных бассейнах и других нетрадиционных горючих ископаемых // *Там же*. – 2011. – № 3. – С. 5–25.
6. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* О целесообразности оперативной оценки перспектив обнаружения новых скоплений углеводородов на территории Украины по данным дистанционного зондирования Земли // *Там же*. – 2011. – № 4. – С. 5–16.
7. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н., Самсонов А. И., Божсежа Д. Н., Якимчук Ю. Н.* Новые данные о перспективах нефтегазоносности восточной части Азово-Черноморского региона Украины // *Теоретические и прикладные аспекты геоинформатики*. – Киев, 2011. – С. 13–32. – [Сб.].
8. *Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* Экспресс-технология “прямых” поисков и разведки скоплений углеводородов геоэлектрическими методами: результаты практического применения в 2001–2005 гг // *Геоинформатика*. – 2006. – № 1. – С. 31–43.
9. *Шуман В. Н., Левашов С. П., Якимчук Н. А., Корчагин И. Н.* Радиоволновые зондирующие системы: элементы теории, состояние и перспективы // *Геоинформатика*. – 2008. – № 2. – С. 22–50.
10. *Solovyov V. D., Bakhmutov V. G., Korchagin I. N. et al.* Gas Hydrates Accumulations on the South Shetland Continental Margin: New Detection Possibilities // *J. Geol. Res.* – 2011. – Article ID 514082, 8 p.
11. *Кринин В. А., Проскураков А. Л., Пьявко А. М. и др.* Применение геоэлектрических методов СКИП-ВЭРЗ для поисков нефти и газа в районе Ванкорского месторождения // *Нефтян. хозяйство*. – 2011. – № 11. – С. 18–21.
12. *Русаков О. М., Пашкевич И. К., Лебедь Т. В., Макаренко И. Б.* Строение поднятия Палласа по комплексной геолого-геофизической интерпретации и перспективы его нефтегазоносности в Украинском секторе Черного моря // *Азово-Черноморский полигон изучения геодинамики и флюидодинамики формирования месторождений нефти и газа: Тез. докл. IX Междунар. конф. “Крым-2011”*. – Симферополь, 2011. – С. 27–29.

*Институт прикладных проблем экологии,
геофизики и геохимии, Киев
Центр менеджмента и маркетинга в области
наук о Земле Института геологических наук
НАН Украины, Киев
Институт геофизики им. С. И. Субботина
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 13.02.2012

С. П. Левашов, член-кореспондент НАН України М. А. Якимчук,
І. М. Корчагін, О. І. Самсонов, Д. М. Божежа

Нові дані про перспективи нафтогазоносності шельфу Чорного моря в районі розташування структур Субботіна та Палласа

Представлено нові результати оцінки перспектив нафтогазоносності мілководної частини Прикерченського шельфу та структури Палласа, що отримані з використанням оригінальної технології частотно-резонансної обробки та інтерпретації даних дистанційного зондування Землі (ДЗЗ) з метою “прямих” пошуків і розвідки родовищ вуглеводнів, рудних корисних копалин, водоносних колекторів. У результаті проведених експериментальних досліджень отримано значний обсяг нової (додаткової) і незалежної інформації про вказані вище перспективи. У комплексі з наявними геолого-геофізичними матеріалами цю інформацію можна використовувати для вибору об’єктів першочергового детального вивчення та розбурювання. За допомогою технології частотно-резонансної обробки і дешифрування даних ДЗЗ може бути виконана оперативна оцінка перспектив нафтогазоносності усіх ділянок і структур в українських секторах Чорного та Азовського морів. Закартовані аномальні зони зіставляються з аномаліями над родовищами “Білий Тигр” та “Дракон” на шельфі В’єтнаму.

S. P. Levashov, Corresponding Member of the NAS of Ukraine N. A. Yakymchuk,
I. N. Korchagin, A. I. Samsonov, D. N. Bozhezha

New data on the oil-and-gas prospects of the Black Sea offshore in the location area of the Subbotin and Pallas structures

The new results of oil and gas prospect assessments of the shallow part of the Kerch shelf and the Pallas structure are given. They were obtained with the help of an original technology of frequency-resonance processing and interpretation of remote sensing data for the “direct” searching and prospecting of hydrocarbons, ore minerals, and water-bearing reservoirs. As a result of experimental studies, a significant amount of new (additional) and, most importantly, independent information about the oil and gas potential of the shallow part of the Kerch shelf and the Pallas structure is obtained. This information jointly with available geological and geophysical materials can be used to select the priority sites for a detailed study and a drilling. With the technology of frequency-resonance processing and the interpretation of remote sensing data, the rapid assessment of the hydrocarbon potential of all sites and structures in the Ukrainian sector of the Black and Azov Seas can be carried out. The mapped anomalous zones are compared with anomalies over “White Tiger” and “Dragon” oilfields on the Vietnam offshore.

В. С. Мостовой

О корректности задачи нелинейной регрессии и сходимости алгоритма поиска глобального минимума в моделях мониторинга

(Представлено академиком НАН Украины В. И. Старостенко)

Рассматривается согласие нелинейных моделей мониторинга с наблюдаемыми данными нелинейных моделей мониторинга. Эти модели основаны на суперпозиции осцилляторов со свободными параметрами. Оптимальную оценку свободных параметров модели, которые входят в модель как линейно, так и нелинейно, будем рассматривать как задачу нелинейной регрессии. Оптимальность понимается в смысле глобального минимума целевого функционала. Точка в пространстве возможных значений свободных параметров модели, в которой критерий имеет глобальный минимум, принимается как оптимальное решение. Для выбранных нелинейных математических моделей нужно выяснить вопросы, связанные с существованием решения, его единственностью и устойчивостью решения в зависимости от начальных данных. Последнее обстоятельство особенно важно, поскольку алгоритмы, построенные на основании этих моделей, ориентированы на непосредственную обработку полевых наблюдений, а значит, на зависимость от характеристик измерительной аппаратуры, ошибок измерения и сопутствующего фона помех.

Согласие нелинейных моделей мониторинга, основанных на суперпозиции осцилляторов со свободными параметрами [1–6], с наблюдаемыми данными будем рассматривать как задачу нелинейной регрессии [7, 8]. Для выбранных нелинейных математических моделей нужно выяснить вопросы, связанные с существованием решения, его единственностью и устойчивостью решения в зависимости от начальных данных. Последнее обстоятельство особенно важно, поскольку алгоритмы, построенные на основании этих моделей, ориентированы на непосредственную обработку полевых наблюдений, а значит, зависимость от характеристик измерительной аппаратуры, ошибок измерения и сопутствующему фону помех.

1. Существование решения задачи регрессии. Предположим, что A — компактное множество в \mathbb{R}^n , B — произвольное множество в \mathbb{R}^m , где n и m — натуральные числа; $F(\cdot, \cdot)$ — непрерывная функция $A \times B \rightarrow \mathbb{R}$, где $A \times B$ — прямое произведение множеств A и B . Для произвольного $y \in B$ рассмотрим следующую оптимизационную задачу:

$$\min_{x \in A} F(x, y). \quad (1)$$

Лемма 1. Для произвольного $y \in B$ существует точка $\hat{x}(y)$, минимизирующая $F(\cdot, y)$ на множестве A .

Доказательство. По теореме о поведении непрерывной функции, заданной на компактном множестве, функция $F(\cdot, y)$ достигает точной нижней грани на множестве A . Следовательно, существует точка $\hat{x}(y)$, минимизирующая $F(\cdot, y)$ на множестве A .

2. Единственности решения задачи (1). При дополнительных условиях на функцию $F(\cdot, \cdot)$ можно показать, что множество точек $y \in B$, таких что решение задачи (1) не единственно, имеет меру Лебега ноль. Физическая или скорее вероятностная интерпретация данного утверждения следующая: если мы предположим, что результаты экспериментов — случайные величины с любым непрерывным распределением, например Гауссовым или равномерным (на подмножестве \mathbb{R}^m), тогда вероятность того, что решение задачи (1) не единственно, равна нулю.

Таким дополнительным условием на функции вида $F(\cdot, \cdot)$ может быть представление $F(\cdot, \cdot)$ в виде композиции непрерывной (но не равной константе) функции и функции, заданной суперпозицией осцилляторов; а также представление функции $F(\cdot, \cdot)$ в виде полинома, отличного от константы. Заметим, что единственность решения оптимизационных задач вида (1), рассмотренных в работах [1–6], подтверждена практическими их исследованиями в численном эксперименте и обработке полевых наблюдений.

3. О непрерывной зависимости от начальных данных.

Лемма 2. Пусть $C = \{y \in B: \text{решение задачи (1) не единственно}\}$. Если дополнение множества C , $C^c = B \setminus C$ — открытое множество в B , то на множестве C^c решение задачи (1), $\hat{x} = \hat{x}(y)$, непрерывно зависит от второй компоненты функции $F(\cdot, \cdot)$.

Доказательство. Из открытости C^c и непрерывности $F(\cdot, \cdot)$ следует, что для любого $y \in C^c$ существует некоторый шар (в Евклидовом пространстве) B_δ , такой, что для любой точки $\hat{y} \in B_\delta$ (т.е. при $\|y - \hat{y}\| < \delta$) мы получим: решение задачи (1), $\hat{x}(y)$ удовлетворяет: $\|\hat{x}(y) - \hat{x}(\hat{y})\| < \varepsilon$ для некоторого $\varepsilon > 0$. Следовательно, для любого $y \in C^c$ мы получим, что для любого $\varepsilon > 0$ существует $\delta > 0$, такое, что для любого $\hat{y}: \|\hat{y} - y\| < \delta$ мы имеем $\|\hat{x}(y) - \hat{x}(\hat{y})\| < \varepsilon$. Заключаем, что решение задачи (1) — непрерывная функция от второй компоненты функции $F(\cdot, \cdot)$ на множестве C^c .

Отметим, открытость множества C^c выполняется для функций, используемых в постановке задачи регрессии (1), на практике. Как указано выше, для практических задач, рассмотренных в работах [1–6], $L(C) = 0$, где $L(C)$ — мера Лебега множества C . С вероятностной точки зрения Лемма 2 показывает, что (при некоторых условиях на $F(\cdot, \cdot)$) решение задачи регрессии непрерывно зависит от начальных данных с вероятностью (1).

Таким образом, задачи вида (1) для функций $F(\cdot, \cdot)$, рассмотренных в работах [1–6], являются корректными [9] с практической точки зрения. При этом строго мы можем показать лишь первое условие корректности — существование решения. Остальные два условия — единственность и непрерывная зависимость от начальных данных выполняются при дополнительных условиях на функцию $F(\cdot, \cdot)$ и подтверждаются практическими исследованиями функций вида $F(\cdot, \cdot)$, рассмотренных в работах [1–6].

4. О сходимости алгоритма решения задачи регрессии. Предположим, что A — компактное подмножество \mathbb{R}^d , где d — натуральное число; $F(\cdot)$ — непрерывная функция $A \rightarrow \mathbb{R}$. Рассмотрим следующую оптимизационную задачу:

$$\min_{x \in A} F(x). \quad (2)$$

В данной части мы исследуем следующий алгоритм поиска приближенного решения задачи (2):

1. На множестве A выбирается некоторая вероятностная мера P , такая, что для любого множества $C \subseteq A$ с положительной мерой Лебега ($L(C) > 0$) выполняется следующее условие: $P(C) > 0$.

2. Выбрасывается N случайных точек $x_n \in A$, $n = \overline{1, N}$, каждая из которых имеет распределение, удовлетворяющее условиям описанным в предыдущем пункте, так что x_n , $n = \overline{1, N}$ — независимые одинаково распределенные случайные величины на A .

3. Для каждого $n = \overline{1, N}$ используя алгоритм Левенберга–Марквардта [10] с начальной точкой x_n находим точку локального минимума \hat{x}_n .

4. Приближенным решением задачи (2) назовем точку $y_N \in \{\hat{x}_1, \dots, \hat{x}_N\}$, такую, что $y_N = \min_{n=\overline{1, N}} F(\hat{x}_n)$.

Предположим, что δ — критерий останова в алгоритме Левенберга–Марквардта, т. е. алгоритм Левенберга–Марквардта прекращается (и мы утверждаем, что локальный минимум найден), если уменьшение значения функции $F(\cdot)$ при двух последовательных итерациях алгоритма не превосходит δ .

Лемма 3. Алгоритм поиска глобального минимума функции $F(\cdot)$, описанный выше, сходится к решению задачи (2) с точностью δ , т. е. $\lim_{N \rightarrow \infty} P[F(y_N) - \min_{x \in A} F(x) > \delta] = 0$.

Доказательство. Пусть z — точка, минимизирующая функцию $F(\cdot)$ на множестве A , т. е. $F(z) = \min_{x \in A} F(x)$. Заметим, что существование z следует из Леммы 1. Так как функция $F(\cdot)$ непрерывна, мы найдем такое число $\rho(z) > 0$, что $B_{\rho(z)}(z) = \{y \in A: \|y - z\| \leq \rho(z)\}$, шар радиуса $\rho(z)$ с центром в точке z , пересеченный с A , содержится в A , и для любого $z_1 \in B_{\rho(z)}(z)$ мы имеем: $F(z_1) \geq F(z)$. Из условия (1) в описании алгоритма следует, что при выбросе случайной точки x выполняется следующее условие: $P[x \in B_{\rho(z)}(z)] > 0$. Следовательно, используя независимость случайных величин x_n , $n = \overline{1, N}$, мы получим, что при выбросе N точек (и соответственных N запусках алгоритма Левенберга–Марквардта) приближенное решение задачи (2) y_N удовлетворяет следующему условию: $P[F(y_N) - F(z) \leq \delta] \geq 1 - (P[x \in B_{\rho(z)}(z)])^N$. Так как $P[x \in B_{\rho(z)}(z)] > 0$, мы заключаем, что $\lim_{N \rightarrow \infty} P[F(y_N) - F(z) \leq \delta] = 1$.

Так как Лемма 3 выполняется для любого критерия останова $\delta > 0$, то, в частности, из Леммы 3 следует, что алгоритм поиска решения задачи (2) сходится по вероятности. Также следует отметить, что для задач, рассмотренных в работах [1–6], описанный выше алгоритм позволяет эффективно решать задачи вида (2). В частности, для этих задач скорость сходимости не является принципиальным вопросом, так как время поиска решения составляет считанные секунды. Тем не менее скорость сходимости может быть определена при дополнительных условиях на функцию $F(\cdot)$ и множество A в задаче (2).

1. Мостовой В. С., Мостовой С. В. Математическое моделирование оценки старения природных и техногенных объектов в системах мониторинга // Доп. НАН України. – 2011. – № 7. – С. 114–118.
2. Мостовой В. С., Мостовой С. В. Оптимальные оценки нелинейных параметров в моделях сейсмоакустического мониторинга // Там само. – 2011. – № 8. – С. 103–107.
3. Мостовой В. С., Мостовой С. В., Кондра С. М., Страшко Ж. С. Оценка информативных параметров состояния строительных конструкций в режиме мониторинга / Пром. стр-во и инж. сооружения. – 2011. – № 1. – С. 24–29.
4. Мостовой В. С. Оптимальное обнаружение сигналов на фоне микросейсмического шума // Доп. НАН України. – 2008. – № 1. – С. 106–110.
5. Мостовой В. С. Математическая модель накопления сейсмических сигналов при активном мониторинге // Там само. – 2008. – № 4. – С. 132–136.
6. Мостовой В. С., Мостовой С. В. Вариационный подход к решению обратной задачи при накоплении сейсмических сигналов в активном мониторинге // Там само. – 2008. – № 8. – С. 113–116.
7. Математическая энциклопедия. Т. 4. – Москва: Сов. энцикл., 1977. – С. 742.
8. Bethea R. M., Duran B. S., Boullion T. L. Statistical methods for engineers and scientists. – New York: Marcel Dekker, 1985. – 105 p.

9. *Evans L. C.* Partial differential equations: methods and applications. – Providence, RI: Amer. Math. Soc., 1998. – 668 p.
10. *Marquardt D.* An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters // SIAM J. Appl. Math. – 1963. – 11. – P. 431–441.

*Институт геофизики им. С. И. Субботина
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 09.12.2011

В. С. Мостовий

Про коректність задач нелінійної регресії і збіжності алгоритму пошуку глобального мінімуму в моделях моніторингу

Розглянуто згоду нелінійних моделей моніторингу із спостереженими даними нелінійних моделей моніторингу. Ці моделі ґрунтуються на суперпозиції осциляторів з вільними параметрами. Оптимальну оцінку вільних параметрів моделі, які входять у модель як лінійно, так і нелінійно, розглядатимемо як задачу нелінійної регресії. Оптимальність розуміється в сенсі глобального мінімуму цільового функціонала. Точка в просторі можливих значень вільних параметрів моделі, в якій критерій має глобальний мінімум, приймається як оптимальне рішення. Для вибраних нелінійних математичних моделей треба з'ясувати питання, що пов'язані з існуванням рішення, його єдиністю і стійкістю рішення залежно від початкових даних. Остання обставина особлива важливо, оскільки алгоритми, що побудовані на підставі цих моделей, орієнтовані на безпосередню обробку польових спостережень, а це означає: залежність від характеристик виміральної апаратури, помилок виміру і супутньому фону перешкод.

V. S. Mostovyi

About the correctness of a nonlinear problem of regression and convergence of an algorithm of search for a global minimum in models of monitoring

A compliance of observed data and nonlinear models of monitoring is considered. These models are based on a superposition of oscillators with free parameters. Optimal estimation of free parameters of a model, which enter into the model both linearly and nonlinearly, is considered as a problem of nonlinear regression. The optimality is understood in the sense of the global minimum of an objective functional. A point in the space of free parameters of the model, at which the criterion has a global minimum, is accepted as the optimal solution of the problem. For the chosen nonlinear mathematical models, it is necessary to find out the questions connected with the existence of a solution and its uniqueness and stability depending on initial data. Last circumstance is especially important, as the algorithms constructed on the basis of these models are oriented on the direct processing of field data. This means the dependence on characteristics of a measuring equipment, errors of measurement, and accompanying background noises.



УДК 544.546:66-922.3+544.723.21

© 2012

Ю. В. Бондарь, Д. Х. Хан

Оптимизация условий радиационно-химического синтеза полипропиленовых волокон с карбоксильными группами

(Представлено академиком НАН Украины Э. В. Соболевичем)

С использованием радиационно-индуцированной прививочной полимеризации мономера “акриловая кислота” на поверхность нетканых полипропиленовых волокон был синтезирован химически активный материал с карбоксильными группами. Проведено исследование влияния экспериментальных параметров на степень прививочной полимеризации акриловой кислоты. Оптимизированы условия синтеза из 20%-го водного раствора мономера при 70 °С.

Полимерные волокнистые химически активные материалы в настоящее время находят широкое применение в процессах очистки сточных вод и/или сорбционного концентрирования ценных металлов [1–5]. Такие материалы благодаря высокоразвитой поверхности характеризуются оптимальными кинетическими параметрами, низким сопротивлением фильтрующего слоя, что позволяет их эффективно использовать в статических и динамических режимах сорбции. Удобная форма волокнистых материалов дает возможность упростить стадию отделения сорбента от раствора, а также возвращать материалы для повторного использования, что обуславливает их преимущества по сравнению с гранулированными и мелкодисперсными неорганическими сорбентами.

Полипропиленовые волокна являются перспективной основой для синтеза хемиактивных материалов. Это обусловлено тем, что полипропилен (ПП) имеет не только прекрасные физико-химические свойства (низкая плотность 0,91–0,92 г/см³, эластичность, устойчивость к двойным изгибам, высокая стойкость к действию кислот, щелочей, органических растворителей, нетоксичность), но и низкую себестоимость.

Широко используемым методом модификации химически инертной основы ПП является радикальная прививочная полимеризация [6], позволяющая вводить на поверхность (и в объем) инертной полимерной матрицы и химически закреплять нано(микро)цепи вторичного мономера с желаемой функциональной группой, контролируя при этом длину и плотность привитых цепей. Прививочная полимеризация может быть инициирована как хими-

ческими, так и радиационными методами. Интенсивно развиваемое направление модификации полимерных материалов получила радиационно-индуцированная прививочная полимеризация под воздействием потока высокоэнергетичных электронов [7–10]. Радиационные методы относятся к “зеленым технологиям”. Их неоспоримыми преимуществами являются экономичность и эффективность использования для модификации промышленно выпускаемого ассортимента полимеров (пленки, гранулы, волокна), готовых изделий, больших площадей или локальных участков.

Синтезу хемиактивных материалов с карбоксильными группами на основе разнообразных полимерных матриц (пленки, волокна, текстиль) путем радиационно-индуцированной прививочной полимеризации мономера “акриловая кислота” посвящено немало публикаций. Такие материалы нашли применение в качестве ионообменников при очистке сточных вод [11], ионопроводящих мембран для химических источников тока [12], а также как матрицы-прекурсора для получения гибридных нанокомпозитов.

В настоящем сообщении рассматриваются результаты исследования радиационно-индуцированной прививочной полимеризации акриловой кислоты (АК) на полипропиленовые волокна с целью нахождения оптимальных условий синтеза хемиактивного полимерного материала с карбоксильными группами.

Материалы и методы исследования. В качестве полимерной основы для проведения радиационно-индуцированной прививочной полимеризации АК (Aldrich) служил нетканый материал из полипропиленовых волокон производства фирмы “Toray-Saehan Co. Ltd”, характеризующийся плотностью 120 г/м², степенью кристалличности 65% и толщиной 1 мм.

Для инициации прививочной полимеризации полипропиленовые волокна облучали потоком ускоренных электронов с энергией 1,0 МэВ на ускорителе конвейерного типа ЭЛВ-04 (Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера СО РАН, Новосибирск, РФ). После облучения материал хранили в эксикаторе при комнатной температуре. Радиационно-индуцированную прививочную полимеризацию проводили на 2–5 сут после электронно-лучевого облучения.

Прививочную полимеризацию АК на облученные полипропиленовые волокна проводили в колбе с водным раствором мономера. Реакционный раствор насыщали азотом; колбу плотно зарывали и термостатировали при заданной температуре. После завершения реакции образец с привитыми цепями полиакриловой кислоты (ПАК) тщательно отмывали горячей водой в аппарате Сокслета от адсорбированных гомополимеров и непрореагировавших мономеров в течение 6–12 ч, сушили в вакуумном шкафу при 80 °С до постоянного веса.

Степень прививочной полимеризации (степень привики) АК ($Q_{\text{пр}}$, %) рассчитывали по результатам гравиметрического анализа — по приросту веса после реакции:

$$Q_{\text{пр}} = \frac{m_1 - m_0}{m_0} \cdot 100,$$

где m_0 и m_1 — массы образца до и после прививки соответственно.

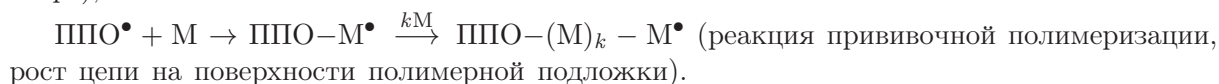
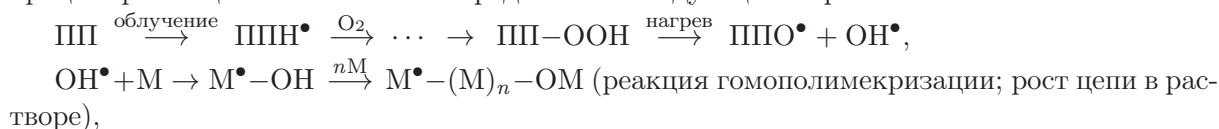
Плотность карбоксильных групп привитых цепей ПАК, введенных в полипропиленовые волокна в результате прививочной полимеризации ($S_{\text{-COOH}}$, ммоль/г), определяли по формуле:

$$S_{\text{-COOH}} = \frac{(m_1 - m_0) \cdot 1000}{m_1 M_{\text{АК}}},$$

где $M_{\text{АК}}$ — молекулярная масса АК.

Исследование морфологии модифицированных волокон проводили с помощью сканирующего электронного микроскопа Hitachi S-4100 (СЭМ-исследования). Наличие функциональных групп регистрировали на ИК-спектрометре Perkin Elmer Golden Gate Single Reflection ATR system.

Для проведения прививочной полимеризации использовали метод предоблучения на воздухе, когда стадии облучения и прививочной полимеризации разделены во времени [7–10]. В результате радиационного облучения полимерной матрицы ускоренными электронами на воздухе образуются первичные алкилрадикалы, которые в присутствии кислорода воздуха моментально трансформируются в перекиси и гидроперекиси (в основном). Последние термически стабильны при комнатной температуре и распадаются при нагревании с образованием макрорадикалов (ППО•) и гидроксилрадикалов (ОН•). Макрорадикал предоставляет место для прививки мономера (М), в то время как гидроксилрадикал может инициировать реакцию гомополимеризации мономера в растворе (образование цепей M_n). Схематически процесс роста цепей может быть представлен следующим образом:



Обрыв цепи может происходить различными путями. Механизм радиационно-индуцированной прививочной полимеризации обсуждался во многих научных публикациях [7–10]. Отметим, что в результате радиационного облучения полимерной матрицы на воздухе в реакционном растворе параллельно идут два процесса — прививочной полимеризации и гомополимеризации (сополимеризация мономеров в растворе без участия в прививочном процессе). Процесс гомополимеризации — нежелательный, побочный — приводит к уменьшению концентрации мономера в растворе, увеличению вязкости реакционного раствора вследствие накопления длинных гомополимерных цепей, уменьшению диффузионной подвижности мономера и, как следствие, к уменьшению степени прививки. Процесс гомополимеризации можно подавить соответствующим ингибитором. В качестве ингибитора используют соли переходных металлов, неорганические и органические кислоты и пр. Подбор ингибитора и его концентрацию осуществляют экспериментально [7–10, 13].

Влияние поглощенной дозы на $Q_{\text{пр}}$. Предварительные исследования показали, что процесс прививочной полимеризации АК на полипропиленовые волокна проходит медленно при невысоких температурах (30 и 50 °С) и в растворах с низкой концентрацией мономера (5 и 10%). Даже при большом времени реакции степень прививки имела низкие значения. Для исследования были выбраны следующие экспериментальные условия: температура 70 °С и концентрация мономера 20%.

Результаты исследования влияния поглощенной дозы ионизирующего излучения ($D_{\text{пог}}$) на степень прививки из 20%-го раствора АК при 70 °С демонстрирует рис. 1. Указанная зависимость имеет линейный характер при увеличении $D_{\text{пог}}$ до 120 кГр. Это связано с тем, что с увеличением $D_{\text{пог}}$ возрастает количество активных центров радиационной прививки, что в свою очередь приводит к увеличению $Q_{\text{пр}}$. Такой же характер зависимости обсуждался в более ранней публикации [14]. Так как толщина нетканого материала составляла 1 мм, для дальнейших экспериментов было выбрано значение $D_{\text{пог}} = 100$ кГр, позволяющее полу-

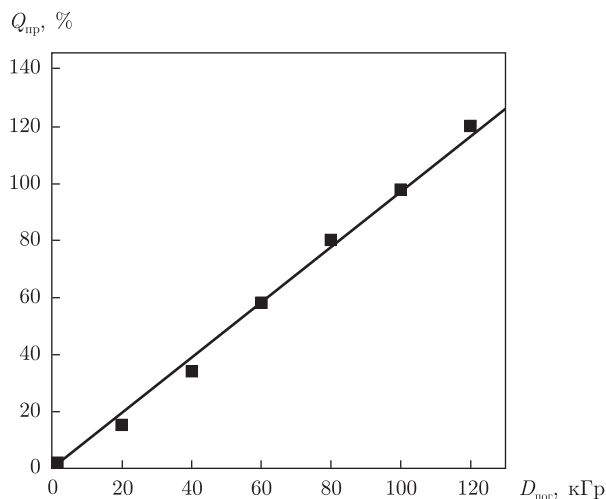


Рис. 1. Влияние поглощенной дозы на степень прививочной полимеризации АК на полипропиленовые волокна. Концентрация АК 20%; температура 70 °С, время реакции 2 ч

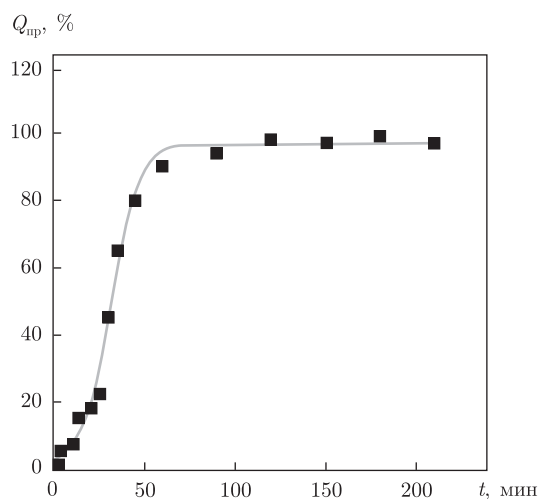


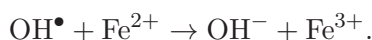
Рис. 2. Влияние времени прививочной полимеризации на степень прививочной полимеризации АК на полипропиленовые волокна. Поглощенная доза 100 кГр; концентрация АК 20%; температура 70 °С

чить образцы с равномерным распределением активных центров по поверхности и объему облученного материала.

Влияние времени реакции на $Q_{\text{пр}}$. Кинетическая кривая прививочной полимеризации представлена на рис. 2. На первом этапе реакции (0–60 мин) $Q_{\text{пр}}$ почти линейно возрастает с увеличением времени прививочной полимеризации и достигает насыщения в интервале 90–120 мин. Следует отметить, что после 60-минутной реакции вязкость реакционного раствора увеличивалась, а после 150-минутной реакции раствор превращался в густой гель. Это означает, что максимальное значение $Q_{\text{пр}}$ (около 100%), полученное при выбранных экспериментальных условиях, ограничивается процессом гомополимеризации.

Влияние ингибитора на $Q_{\text{пр}}$. Ранее отмечалось, что гомополимеризация — побочный процесс прививочной полимеризации, чье влияние на степень прививки можно уменьшить добавлением соответствующего ингибитора. В качестве ингибитора широко исполь-

зуют соль Мора — $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Полагают, что ионы двухвалентного железа участвуют в реакции деактивации гидроксилрадикала, инициирующего реакцию гомополимеризации [9, 10, 13, 14]:



Подбор ингибитора и его концентрацию осуществляют экспериментально, так как ионы переходных металлов могут инициировать распад гидроперекисей уже при комнатной температуре ($\text{ПП-ООН} + \text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{ППО}^\bullet + \text{OH}^- + \text{Fe}^{3+}$), а также деактивировать прививочный процесс ($\text{ППО}^\bullet + \text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{ППО}^- + \text{Fe}^{3+}$), что ведет к уменьшению $Q_{\text{пр}}$.

Табл. 1 демонстрирует следующее: при выбранных экспериментальных условиях ($D_{\text{пор}}$ 100 кГр; время реакции 2 ч, температура 70 °С, концентрация АК 20%) $Q_{\text{пр}}$ возрастает почти в 6 раз, т. е. с 98% до максимального значения 580% при массовом содержании соли Мора в растворе $5 \cdot 10^{-4}\%$. Таким образом, подбирая концентрацию ингибитора, удается значительно увеличить степень прививки АК в пределах выбранных экспериментальных условий. Следует отметить, что при дальнейшем увеличении концентрации ингибитора $Q_{\text{пр}}$ уменьшается, по-видимому, в связи с деактивацией прививочного процесса. Такая же тенденция была получена при проведении прививочной полимеризации АК из растворов с более низкими значениями концентрации мономера — 15 и 10% (см. табл. 1).

Физико-химические характеристики модифицированных полипропиленовых волокон. Было проведено СЭМ-исследование поверхности первичных и модифицированных волокон. Первичные полипропиленовые волокна имели диаметр 20 мкм. После прививочной полимеризации АК диаметр волокон увеличивался в зависимости от степени прививки: 56% — 27 мкм; 84% — 28 мкм; 178% — 31 мкм. СЭМ-изображения показали, что привитые цепи ПАК образуют гомогенный равномерный слой на полипропиленовых волокнах со средними значениями степени прививки — 70–200%.

В результате радиационно-индуцированной прививочной полимеризации АК на поверхности полипропиленовых волокон появились ковалентно закрепленные химически активные карбоксильные группы. Рис. 3, а иллюстрирует ИК-спектры первичных полипропиленовых волокон и полипропиленовых волокон с привитыми цепями ПАК с разными степенями прививочной полимеризации. В ИК-спектрах модифицированных полипропиленовых волокон наблюдается полоса поглощения карбонильной группы ($-\text{C}=\text{O}$) АК при 1715 см^{-1} , интенсивность которой возрастает с увеличением степени прививки.

Таким образом, варьируя экспериментальные параметры (дозу облучения, продолжительность реакции, концентрацию ингибитора) при проведении прививочной полимеризации АК из 20%-го водного раствора при 70 °С были получены образцы с широким спектром плотности карбоксильных групп (см. б на рис. 3).

Таблица 1. Влияние концентрации соли Мора в растворе на степень прививочной полимеризации АК на полипропиленовые волокна

Концентрация АК, %	Массовая концентрация соли Мора в растворе, %				
	0	$1 \cdot 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^{-2}$
20	98	400	580	560	92
15	80	130	300	270	87
10	20	50	55	50	42

Примечание. Поглощенная доза 100 кГр; время реакции 2 ч, температура 70 °С.

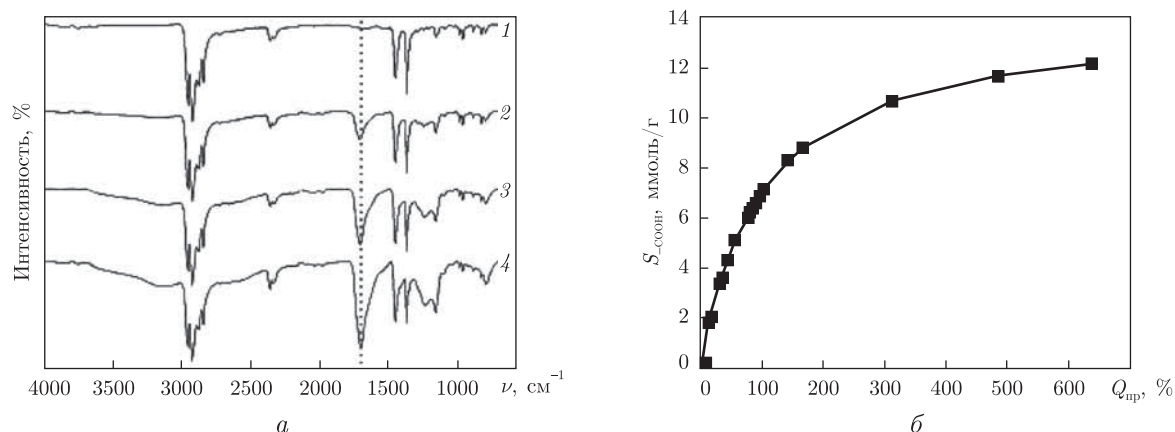


Рис. 3. Физико-химические характеристики модифицированных полипропиленовых волокон: *a* — ИК-спектры исходных полипропиленовых волокон (1); полипропиленовых волокон с привитыми цепями ПАК ($Q_{\text{пр}} = 46\%$ (2), $Q_{\text{пр}} = 76\%$ (3) и $Q_{\text{пр}} = 90\%$ (4)); *б* — зависимость плотности привитых карбоксильных групп от степени прививочной полимеризации АК на полипропиленовые волокна

На основании проведенных исследований можно отметить, что нами синтезирован хемиактивный материал на основе нетканых полипропиленовых волокон путем радиационно-индуцированной прививочной полимеризации винилового мономера “акриловая кислота”. Используя метод предоблучения на воздухе, определено влияние экспериментальных параметров — поглощенной дозы, продолжительности реакции и концентрации ингибитора на процесс прививочной полимеризации АК из 20%-го водного раствора мономера при 70 °С.

Установлено, что максимальное значение степени прививки ограничивается процессом гомополимеризации. Добавление ингибитора гомополимеризации в реакционный раствор позволяет существенно увеличить степень прививки АК. При массовом содержании соли Мора в растворе $5 \cdot 10^{-4}\%$ нами получено максимальное значение степени прививки 580%, которое превышало значение, полученное без использования ингибитора, в 6 раз.

1. *Зверев М. П.* Хемосорбционные волокна. — Москва: Химия, 1981. — 191 с.
2. *Дружинина Т. В., Назаркина Л. А., Кардаш К. В.* Сорбционно-активные модифицированные химические волокна // Хим. волокна. — 2000. — **32**, № 6. — С. 18–21.
3. *Мясоедова Г. В., Никашина В. А., Молочникова Н. П., Лилеева Л. В.* Свойства новых типов волокнистых сорбентов с амидоксимными и гидразиновыми группами // Журн. аналит. химии. — 2000. — **55**, № 6. — С. 611–615.
4. *Солдатов В. С., Шункевич А. А., Марцинкевич В. В.* Сравнительные исследования процесса умягчения воды гранульными и волокнистыми ионитами // Журн. прикл. химии. — 2001. — **74**, № 9. — С. 1477–1480.
5. *Seko N., Tamada M., Yoshii F.* Current status of adsorbent for metal ions with radiation grafting and crosslinking techniques // Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. — 2005. — **236B**, No 1. — P. 21–29.
6. *Kato K., Uchida E., Kang E. et al.* Polymer surface with graft chains // Prog. Polym. Sci. — 2003. — **28**, No 2. — P. 209–259.
7. *Chapiro A.* Radiation Chemistry of Polymeric Systems. — New York: Interscience, 1962. — 712 p.
8. *Иванов В. С.* Радиационная химия полимеров. — Ленинград: Химия, 1988. — 151 с.
9. *Bhattacharya A., Misra B. N.* Grafting: a versatile means to modify polymers. Techniques, factors and applications // Prog. Polym. Sci. — 2004. — **29**, No 8. — P. 767–814.
10. *Nasef M. M., Hegazy E. A.* Preparation and applications of ion exchange membranes by radiation-induced graft copolymerization of polar monomers onto non-polar films // Ibid. — 2004. — **29**, No 6. — P. 499–561.

11. Ji Z., Bei Y., Liu Q. Removal of copper ions from aqueous solution with a weak cation exchanger by radiation-induction grafting acrylic acid onto polypropylene fiber // Int. J. Ind. Chem. – 2011. – **2**, No 1. – P. 23–26.
12. Choi S. H., Nho Y. C. Introduction of carboxylic acid group to polypropylene fabric for battery separator // Korean J. Chem. Eng. – 1999. – **16**, No 4. – P. 505–510.
13. Garnett J. L., Jankiewicz S. V., Long M. A., Sangster D. F. The role of inorganic salts in accelerating the radiation-induced grafting of styrene to cellulose and polyethylene // J. Polym. Sci., Polym. Lett. Ed. – 1985. – **23**, No 11. – P. 563–566.
14. Chen J., Nho Y. C., Pak J. S. Grafting polymerization of acrylic acid onto preirradiated polypropylene fabric // Radiat. Phys. Chem. – 1998. – **52**, No 1–6. – P. 201–206.

Институт геохимии окружающей среды

НАН Украины, Киев

Еунгнамский университет, Генгсан, Южная Корея

Поступило в редакцию 20.02.2012

Ю. В. Бондар, Д. Х. Хан

Оптимізація умов радіаційно-хімічного синтезу поліпропіленових волокон з карбоксильними групами

С використанням радіаційно-індукованої прищепної полімеризації мономера “акрилова кислота” на поверхню нетканих поліпропіленових волокон був синтезований хімічно активний матеріал з карбоксильними групами. Проведено дослідження впливу експериментальних параметрів на ступінь прищепної полімеризації акрилової кислоти. Оптимізовано умови синтезу з 20%-го водного розчину мономера при 70 °С.

Iu. V. Bondar, D. H. Han

Optimization of conditions of radiation-chemical synthesis of polypropylene fibers with carboxyl groups

A chemically active material carrying carboxylic groups is synthesized by the radiation-induced graft polymerization of acrylic acid monomers onto the surface of nonwoven polypropylene fibers. The effect of the experimental parameters on the acrylic acid grafting degree is investigated. Conditions of the synthesis from a 20% water solution of the monomer at 70 °C are optimized.

М. В. Манило, И. А. Арьев, Г. С. Литвинов

Адсорбция глицина углеродными нанотрубками*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Ю. И. Тарасевичем)*

Исследована адсорбция глицина из водных растворов на поверхности углеродных нанотрубок. Изучение зависимости кинетики и параметров адсорбции аминокислоты проводилось в интервале рН от 1,84 до 12,05. Для концентраций адсорбатов $(0,1-2,2) \cdot 10^{-3}$ моль/дм³ получены изотермы адсорбции и рассчитаны свободные энергии адсорбции и посадочные площадки.

В настоящее время активно ведутся исследования по разработке новых эффективных средств целенаправленной доставки биологически важных и лекарственных веществ нанобъектами непосредственно к органам и тканям. Особого внимания в развитии данного направления нанотехнологий заслуживают углеродные нанотрубки (УНТ). УНТ применяются в биотехнологиях и медицине для транспортировки вакцин [1] и других лекарственных средств [2] (как емкость для хранения и транспортирования генов [3]), для стимулирования иммунной системы [1], в сенсорах для определения генетических и других молекулярных аномалий, а также в качестве субстрата при выращивании нейронов и эндотелиальных клеток для регенерации тканей [4].

Глицин как простейшая из аминокислот алифатического ряда часто используется в физической химии в качестве модельного объекта. Входит в состав белков и служит предшественником в биосинтезе порфириновых соединений и пуриновых оснований нуклеиновых кислот, является лекарственным седативным средством и компонентом парентерального питания. В научных публикациях представлены результаты детальных исследований адсорбции глицина на традиционных сорбентах: слоистых силикатах [5], цеолитах [6], анионообменных [7] и катионообменных [8] смолах, оксиде алюминия [9].

В данном сообщении приведены результаты экспериментальных исследований адсорбции глицина из водных растворов на углеродной поверхности в различных условиях. Нами использовались глицин марки “х. ч.” производства Reanal (Венгрия) и многослойные углеродные нанотрубки (Спецмаш, Украина) с удельной поверхностью 254 м²/г, внешним диаметром 10–20 нм, длиной 1–10 мкм.

Адсорбция глицина углеродными нанотрубками проходила при температуре (293 ± 1) К на шейкере в темноте при различных рН, значения которых поддерживались буферными растворами в интервале от 1,84 до 12,05. Определение концентрации глицина до и после сорбции проводилось с точностью до $1,1 \cdot 10^{-5}$ моль/дм³ методом двухволновой спектрофотометрии по реакции глицина с нингидрином [10].

Графики зависимостей кинетики адсорбции глицина на УНТ для некоторых по совокупности исследованных рН приведены на рис. 1, из которого видно, что формы полученных кинетических кривых и величины адсорбции зависят от рН. Следует отметить, что время насыщения адсорбции глицина на поверхности УНТ в 6–8 раз меньше, чем на поверхности обработанного щелочью оксида алюминия [9].

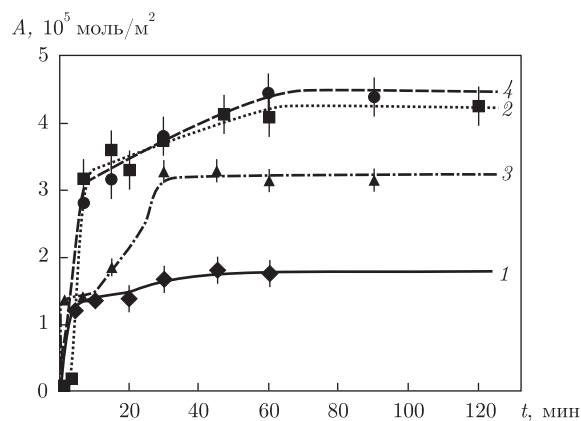


Рис. 1. Кинетика адсорбции глицина УНТ при различных рН: 1 — 3,00 (концентрация $1,21 \cdot 10^{-3}$ моль/дм³); 2 — 5,00 (концентрация $1,38 \cdot 10^{-3}$ моль/дм³); 3 — 7,00 (концентрация $1,38 \cdot 10^{-3}$ моль/дм³); 4 — 9,00 (концентрация $1,33 \cdot 10^{-3}$ моль/дм³)

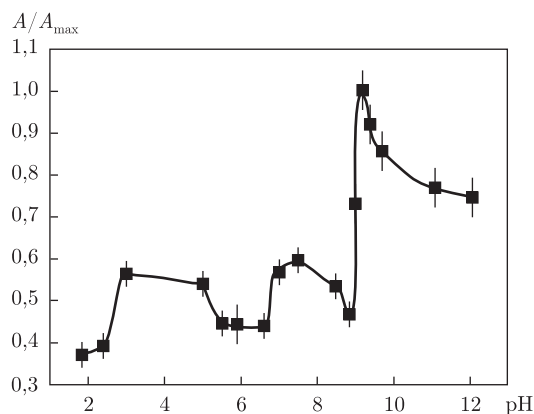


Рис. 2. Зависимость приведенной адсорбции глицина от рН раствора при концентрациях, моль/дм³: $(3 \pm 0,5) \cdot 10^{-3}$; $(10 \pm 1) \cdot 10^{-3}$

В табл. 1 приведены результаты исследований характеристик адсорбции глицина для предельного заполнения поверхности УНТ, а на рис. 2 показана зависимость приведенной адсорбции глицина от рН раствора. Из рисунка следует, что приведенная адсорбция глицина поверхностью УНТ имеет два слабо выраженных минимума в интервале рН от 1,84 до 8,84, резкий максимум при рН 9,20. Таким образом, адсорбция мало зависит от рН в интервале кислых и близких к нейтральным значениям и резко возрастает при переходе к анионной форме молекулы глицина в растворе (табл. 2). При этом, по-видимому, вследствие конкуренции разных электролитических форм за связывание при некоторых значениях рН имеют

Таблица 1. Основные параметры адсорбции глицина на поверхности УНТ при различных рН растворов

Значение рН	Константа скорости, $k \cdot 10^5$, дм ³ /(моль · мин)	Емкость сорбента, ммоль/г	Предельная адсорбция УНТ, мг/м ²
3,00	$0,35 \pm 0,03$	$0,994 \pm 0,0005$	$27,57 \pm 1,43$
5,00	$0,55 \pm 0,02$	$1,100 \pm 0,001$	$31,56 \pm 1,49$
7,00	$2,77 \pm 0,40$	$1,550 \pm 0,001$	$44,26 \pm 2,31$
9,20	$0,20 \pm 0,01$	$4,000 \pm 0,001$	$111,01 \pm 5,77$

место особые точки. Так, минимум адсорбции вблизи рН 6,00 (изоэлектрическая точка) [11] может быть обусловлен минимумом содержания двух других форм глицина — с депротонированной карбоксильной группой и с протонированной аминной группой. Аналогичное распределение ионных форм было получено в работе [12] для глицил-глицина.

Максимальная адсорбция достигалась при рН, близких к значению $pK_2 = 9,60$ аминогруппы [11], что отличается от результатов работы [9] по адсорбции глицина на оксиде алюминия смещением максимума адсорбции в область щелочных рН. Эта особенность, вероятно, связана с различием механизмов адсорбции молекул амфолитов на заряженных (оксид алюминия) и незаряженных (УНТ) поверхностях. Адсорбция заметно уменьшалась для значений рН в интервале от 9,40 до 12,05, приводящих к уменьшению содержания всех форм глицина, кроме депротонированной, и увеличению доли депротонированной. Вместе с тем емкость сорбента и адсорбция возрастали симбатно с ростом рН до 9,20, т. е. с депротонизацией карбоксильной группы и увеличением распределенного (отрицательного) заряда молекулы глицина вблизи pK_2 аминогруппы.

Отметим, что полученные нами значения емкости адсорбции глицина углеродной поверхностью в исследованных условиях почти в 5 раз превышали аналогичные значения для оксида алюминия [9] и анионообменной смолы [7]. В совокупности с указанным ранее 8-кратным уменьшением времени насыщения адсорбции это свидетельствует о предпочтительности использования углеродных наноструктур для приготовления биотехнологических средств доставки глицина к биологическим мишеням.

Изотермы адсорбции глицина при рН 3,00, 6,00 и 9,20 для концентрации УНТ ($0,1 \pm \pm 0,01$) г/дм³ иллюстрирует рис. 3. Из графиков, приведенных на рисунке, следует, что адсорбция глицина на УНТ имеет полимолекулярный характер при $C > 3,0 \cdot 10^{-4}$, $C > 4,7 \cdot 10^{-4}$ и $C > 9,2 \cdot 10^{-4}$ моль/дм³ при рН 6,00, 3,00 и 9,20 соответственно. Этот результат может быть объяснен, исходя из теоретических представлений А. И. Китайгородского (1955) о формах и структуре изотерм полимолекулярной адсорбции гетерогенной смеси молекул, конкурирующих за связывание с однородной поверхностью сорбента. В частности, вид полученных кривых отражает явления мономолекулярной адсорбции (область Генри при малых концентрациях адсорбтива), насыщения, формирования и двухмерной конденсации моле-

Таблица 2. Распределение ионных форм глицина (C , %)

Значение рН	Протонированная форма $\text{H}_3\text{N}^+ - \underset{\text{H}}{\text{CH}} - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{OH}$	Цвиттер-ион $\text{H}_3\text{N}^+ - \underset{\text{H}}{\text{CH}} - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{O}^-$	Нейтральная форма $\text{H}_2\text{N} - \underset{\text{H}}{\text{CH}} - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{OH}$	Депротонированная форма $\text{H}_2\text{N} - \underset{\text{H}}{\text{CH}} - \overset{\text{O}}{\parallel} \text{C} - \text{O}^-$
1,84	75,75	23,95	$9,2 \cdot 10^{-5}$	$4,2 \cdot 10^{-8}$
2,40	46,55	53,44	$2,1 \cdot 10^{-4}$	$3,4 \cdot 10^{-6}$
3,00	17,95	82,04	$3,2 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-5}$
5,00	0,21	99,77	$3,8 \cdot 10^{-4}$	$2,5 \cdot 10^{-3}$
6,00	$2,18 \cdot 10^{-2}$	99,95	$3,8 \cdot 10^{-4}$	$2,5 \cdot 10^{-2}$
7,00	$2,18 \cdot 10^{-3}$	99,75	$3,8 \cdot 10^{-4}$	0,24
8,84	$2,69 \cdot 10^{-5}$	85,05	$3,3 \cdot 10^{-4}$	14,77
9,20	$9,88 \cdot 10^{-6}$	71,54	$2,8 \cdot 10^{-4}$	28,45
9,68	$2,08 \cdot 10^{-6}$	45,43	$1,7 \cdot 10^{-4}$	54,53
12,05	$8,68 \cdot 10^{-11}$	0,39	$1,5 \cdot 10^{-6}$	99,59

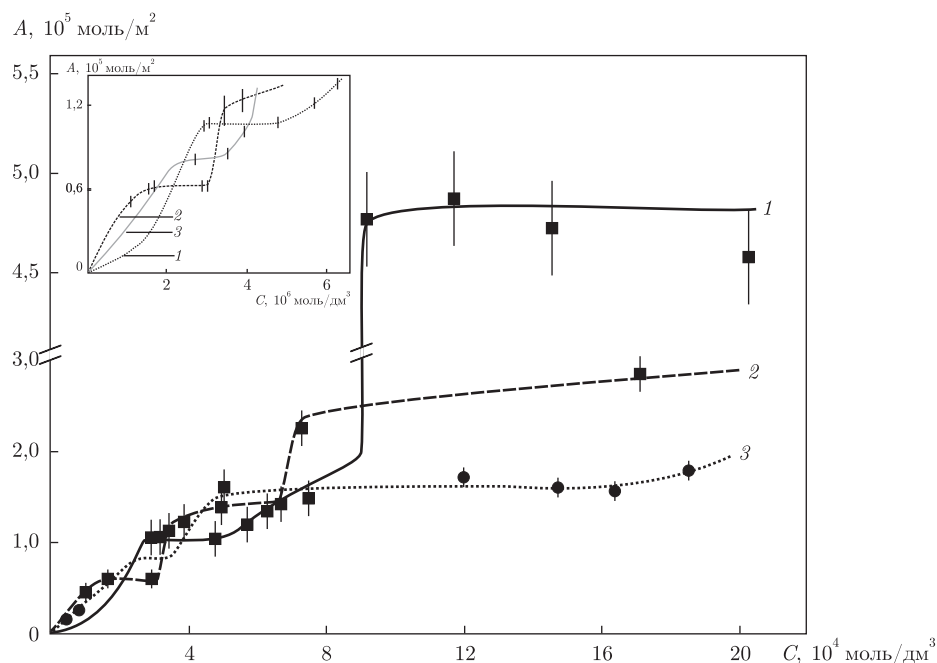


Рис. 3. Изотермы адсорбции глицина на поверхности нанотрубок: 1 — при рН 9,20; 2 — при рН 6,00; 3 — при рН 3,00.

На врезке показаны участки изотерм при малых равновесных концентрациях глицина

кул первого слоя, и, по-видимому, начала и завершения формирования бимолекулярного слоя.

Наблюдаемые на рис. 3 особенности многоступенчатых изотерм для кислотных и щелочных рН могут объясняться различиями сорбции/десорбции для молекул глицина четырех разных электролитических форм (см. табл. 2), существующих при исследованных рН в различных соотношениях и дающих неодинаковый вклад в кинетику, энергию связывания и другие параметры адсорбции.

В табл. 3 приведены рассчитанные значения посадочных площадок, констант равновесия и свободной энергии Гиббса адсорбции молекулы глицина для некоторых исследованных нами рН для первого слоя.

Величины посадочных площадок близки к значениям, рассчитанным нами соответственно по кристаллографическим данным для молекул глицина в *ac*-плоскости элементарной ячейки кристалла ($0,14 \text{ nm}^2$), согласно Китайгородскому, и по плотности кристаллического глицина ($0,18 \text{ nm}^2$) [13] в квазисферическом приближении. Наряду с этим следует подчеркнуть, что посадочная площадка молекулы глицина на поверхности УНТ оказывается приблизительно в 5 раз меньшей, чем рассчитанная по данным сорбции молекул глици-

Таблица 3. Посадочные площадки (s), константы равновесия (k_f) и свободные энергии Гиббса (G) при связывании молекул глицина на поверхности УНТ

Значение рН	$s, \text{ nm}^2$	$k_f \cdot 10^{-3}$	$-G, \text{ кДж/моль}$
3,00	$0,196 \pm 0,092$	$3,491 \pm 0,096$	$19,86 \pm 0,07$
6,00	$0,263 \pm 0,002$	$6,003 \pm 0,018$	$21,18 \pm 0,01$
9,20	$0,155 \pm 0,058$	$3,298 \pm 0,044$	$19,73 \pm 0,04$

на на поверхности оксида алюминия, активированной щелочью [9]. Этот факт, коррелируя с упомянутым в 6–8 раз меньшим, чем наблюдавшийся в [9], временем насыщения адсорбции, свидетельствует о плотной двухмерной упаковке молекул глицина на квазидвухмерной для них поверхности УНТ в отличие от активно-центрального, относительно рыхлого распределения молекул глицина при взаимодействии смеси электролитических форм молекулы с заряженными группами на поверхности оксида алюминия.

Вместе с тем нами обнаружено, что при увеличении pH с 3,00 до 9,20 происходит уменьшение посадочной площадки на 25%, т. е. имеет место компактизация мономолекулярного слоя молекул глицина на поверхности адсорбента вплоть до предельного сближения молекул глицина, соответствующего их наибольшей упаковке, характерной в *ac*-слое молекул элементарной ячейки кристалла, вследствие сильного латерального взаимодействия за счет водородных связей.

Следует отметить, что рассчитанные по экспериментальным данным значения свободных энергий Гиббса (~ 20 кДж/моль) характерны, по существующим представлениям, для физической адсорбции. Заметно превышая энергию теплового разупорядочения ($\sim 3,6$ кДж/моль), свободные энергии вместе с тем сравнимы с ней, что указывает на динамичность адсорбционно-десорбционного процесса при физиологических условиях, допускающих возможность управления десорбцией молекул глицина с поверхности УНТ при их доставке к биотехнологическим или организменным мишеням. Близкие значения свободных энергий Гиббса были получены для аденозина, аденозинмонофосфата и аденозинтрифосфата [14].

Таким образом, адсорбция молекул глицина из водно-буферных растворов на поверхности углеродных нанотрубок имеет свободные энергии, характерные для физической сорбции. Адсорбция глицина из водных растворов на углеродной поверхности при концентрациях более $4,7 \cdot 10^{-4}$, $3,0 \cdot 10^{-4}$ и $9,2 \cdot 10^{-4}$ моль/дм³ для pH соответственно 3,00, 6,00 и 9,20 имеет конкурентный полимолекулярный характер, что обусловлено наличием различных таутомерных электрических форм молекулы глицина в таких растворах. Экспериментальные посадочные площадки оказались близки к значениям, характерным для кристаллического глицина с плотной упаковкой молекул. Скорость адсорбции глицина на углеродных нанотрубках выше, чем на оксиде алюминия, а максимальная адсорбция и минимальная посадочная площадка наблюдаются при pH 9,20. Полученные экспериментальные данные коррелируют с теоретическими моделями полимолекулярной адсорбции компонентов гетерогенных растворов твердыми адсорбентами.

1. Bianco A., Prato M. Can carbon nanotubes be considered useful tools for biological applications? // Adv. Mater. Res. – 2003. – **15**. – P. 1765–1768.
2. Bianco A., Kostarelos K., Prato M. Applications of carbon nanotubes in drug delivery // Curr. Opin. Chem. Biol. – 2005. – **9**. – P. 674–679.
3. Singh R., Pantarotto D., McCarthy D. et al. Binding and condensation of plasmid DNA onto functionalized carbon nanotubes: toward the construction of nanotube-based gene delivery vectors // J. Am. Chem. Soc. – 2005. – **127**. – P. 4388–4396.
4. Lacerda L., Bianco A., Prato M. et al. Carbon nanotubes as nanomedicines: From toxicology to pharmacology // Adv. Drug Deliv. – 2006. – **58**. – P. 1460–1470.
5. Тарасевич Ю. И. Поверхностные явления на дисперсных материалах. – Киев: Наук. думка, 2011. – 390 с.
6. Ching C. B., Ruthven D. M. Sorption and diffusion of some amino acids in KX zeolite crystals // Chem. Eng. J. – 1989. – **40**, No 1. – P. B1–B5.
7. Haynes J. L. The sorption of glycine by a strong anion exchange resin // Surface Sci. – 1968. – **10**, No 3. – P. 327–331.

8. *Haynes J. L.* The sorption of glycine by a strong cation exchange resin // *J. Colloid and Interface Sci.* – 1970. – **32**, No 2. – P. 282–285.
9. *Moitra S., Mundhara G. L., Tiwari J. S.* Sorption-desorption behaviour of the amino acids glycine and serine on chemically pretreated alumina // *Ibid.* – 1988. – **125**, No 2. – P. 420–427.
10. *Кореньман И. М.* Фотометрический анализ. Методы определения органических соединений. – Москва: Химия, 1975. – 360 с.
11. *Альберт А., Серженет Е.* Константы ионизации кислот и оснований. – Москва: Химия, 1964. – 180 с.
12. *Наумов В. В., Исаева В. А., Шарнин В. А., Кузина Е. Н.* Константы кислотно-основных равновесий глицил-глицина в водно-диметилсульфоксидных растворах при 298 К // *Журн. физ. химии.* – 2011. – **86**, № 10. – С. 1881–1884.
13. *Справочник химика* / Под ред. Б. П. Никольского. Т. 2. – Москва: Химия, 1964. – 1169 с.
14. *Манило М. В., Алексеева Т. А., Ар'ев И. А., Лебовка Н. И.* Адсорбция аденозина, аденозинмонофосфата и аденозинтрифосфата из водных растворов на поверхности многослойных углеродных нанотрубок // *Коллоид. журн.* – 2011. – **73**, № 2. – С. 235–238.

*Институт биокolloидной химии
им. Ф. Д. Овчаренко НАН Украины, Киев
НТУ Украины “Киевский политехнический институт”*

Поступило в редакцию 09.02.2012

М. В. Маніло, І. А. Ар'єв, Г. С. Литвинов

Адсорбція гліцину вуглецевими нанотрубками

Досліджено адсорбцію гліцину з водних розчинів на поверхні вуглецевих нанотрубок. Залежності кінетики та параметрів адсорбції амінокислоти вивчали в інтервалі рН від 1,84 до 12,05. Для концентрацій адсорбатів $(0,1-2,2) \cdot 10^{-3}$ моль/дм³ отримано ізотерми адсорбції та розраховано вільні енергії адсорбції та посадкові площадки.

M. V. Manilo, I. A. Ar'ev, G. S. Lytvynov

Adsorption of glycine onto carbon nanotubes

Adsorption of glycine from aqueous solutions on the surface of carbon nanotubes is studied. Study of the dependence of the adsorption kinetics and parameters of the amino acid adsorption is carried out in the pH range 1.84–12.05. For concentrations of adsorbates $0.1-2.2 \cdot 10^{-3}$ mol/dm³, we have obtained adsorption isotherms and calculated the free energies of adsorption and landing sites.

Ю. В. Савельев, И. В. Янович, Е. Р. Ахранович,
Л. А. Марковская, Ю. А. Будащ, О. А. Савельева

Пенополиуретаны на основе природных полисахаридов

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Ю. Ю. Керчой)

Синтезированы новые пенополиуретаны (ППУ), в структуру которых встроены химически связанные природные полисахариды (ПС). Введение ПС в структуру ППУ дает возможность сохранить функциональные характеристики пенополиуретанов и придать им способность деградировать в условиях окружающей среды по окончании срока их эксплуатации.

Поиск безопасных, с точки зрения экологии, решений актуальных проблем, включающих борьбу с изменением климата и деградацией окружающей среды, повышением энергетической безопасности и созданием новых двигателей экономического роста — основная цель “зеленой” химии [1]. Одним из направлений решения этой проблемы являются материалы с регулируемым сроком службы, по истечении которого они подвергаются процессам деградации в условиях окружающей среды. Свойства таких полимерных материалов определяются соотношением и степенью совместимости компонентов, структурой и морфологией получаемых материалов [2].

Пенополиуретаны (ППУ) — известный и широко применяемый в практике класс полимеров [3]. ППУ синтезируют на основе реагентов различных классов органических соединений, что дает возможность направленно варьировать структуру, а значит, и макросвойства полимера. Путем структурно-химической модификации ППУ в их структуру могут быть введены различные функциональные соединения. Встраивание в структуру ППУ полисахаридных (ПС) фрагментов дает возможность сохранить присущие этим материалам функциональные характеристики и придать способность к деградации в условиях окружающей среды по окончании срока их использования [4].

Ранее [5] нами синтезированы новые ППУ с химически встроенными в макроцепь дисахаридами. Показано [6], что введение дисахаридов в макроцепь инициирует процесс деградации ППУ под действием факторов окружающей среды, таких, как повышенная влажность и температура, кислотная и щелочная среда, грибы, главным образом, родов *Aspergillus* и *Penicillium*.

Цель исследования — создание новых деградирующих в условиях окружающей среды ППУ на основе природных ПС, изучение их свойств и способности к деградации путем моделирования процессов, происходящих в окружающей среде.

Экспериментальная часть. Для синтеза ППУ использовали: простые и сложные олигоэфиры; толуилендиизоцианат; катализаторы: *трис*-(диметиламинометил)фенол, октоат олова; стабилизаторы пены: блок-сополимер полидиметилсилоксана и алкиленоксидов, вазелиновое масло. Из многообразия природных ПС нами были выбраны крахмал (Кр), натрий карбоксиметилцеллюлоза (Na-КМЦ), натрий альгинат (Na-Ал) и гидроксипропилцеллюлоза (ГЭЦ). Водные гели ПС (концентрация 10% (Na-Ал, Кр, ГЭЦ) и 5% (Na-КМЦ)) вводили в олигоэфирную составляющую. Получены ППУ с содержанием ПС от 2 до 16% для

Na-Ал, от 2 до 8% для Кр и ГЭЦ и от 1 до 8% для Na-КМЦ в перерасчете на сухой остаток. Объект сравнения — ППУ, не содержащий в своем составе ПС (ППУ-матрица). Вспенивающий агент во всех случаях — CO_2 , полученный реакцией взаимодействия воды и изоцианата.

Методы исследований. Объемный вес определяли, согласно данным, приведенным в [7]. Разрушающее напряжение при растяжении и относительное удлинение в момент разрыва определяли на разрывной машине FU-1000 (Германия) [8]. Образцы ППУ для испытаний имели форму дисков ($d = 25$ мм, $h = 10$ мм), приклеенных параллельными плоскостями к металлическим образцам. Скорость движения зажима машины 25 мм/мин. Разрыв образцов происходил по ППУ. Влагопоглощение и паропроницаемость определяли по [9]. Толщина исследуемых образцов 10 мм.

Количественное определение характеристик ячеек образцов выполнялось методом анализа изображений [10] в программе ImageJ [11]. Цифровые изображения предварительно контрастированной поверхности среза образцов ППУ получали сканированием. Статистическую обработку данных проводили, используя пакет статистического анализа STATISTICA 7 (Statsoft) (демоверсия).

Состав летучих продуктов (ЛП) и интенсивность их выделения при пиролизе исследуемых ППУ изучали методом пиролитической масс-спектрометрии (ПМС) на масс-спектрометре MX-1321 с определением компонентов газовых смесей в диапазоне массовых чисел 1–4000 [12].

ИК-спектры регистрировали на спектрометре “Tensor-37” с фурье-преобразованием в области $800\text{--}4000\text{ см}^{-1}$ методом МНПВО.

Исследование деградации ППУ проводили по методике, позволяющей моделировать процессы, происходящие в природных условиях [13]. Образцы экспонировали в контейнеры с почвой (рН 7,3; относительная влажность 60%; $t = 12\text{--}25$ °С) на срок от 1 до 12 мес. Определение микрофлоры почвы показало присутствие грибов родов *Rhizopus*, *Aspergillus*, *Penicillium*. Используемая почва имела среднюю биологическую активность (Δm льняного полотна после 1 мес. экспонирования в ней $-34,6\%$) [14]. Скорость деградации контролировали по Δm образцов через определенные промежутки времени. Влияние кислой и щелочной сред определяли, выдерживая образцы ППУ в 0,1 н. растворах HCl и KOH (1 мес. при $(37,0 \pm 1)$ °С).

Результаты и их обсуждение. Синтез ППУ на основе природных ПС предполагает сочетание функциональных свойств ППУ со способностью к деградации под воздействием различных природных факторов. Как видно из табл. 1, синтезированные нами ППУ на основе ПС имеют деформационно-прочностные характеристики, сравнимые с этими же характеристиками для ППУ-матрицы. Увеличение количества ПС в ППУ приводит к росту прочности и снижению относительного удлинения образцов. И только в случае использования ГЭЦ эти показатели увеличиваются, что, вероятно, объясняется лучшей стерической доступностью гидроксильных ГЭЦ (по сравнению с другими ПС) в реакциях с NCO-группами и для образования водородных связей. Все использованные нами ПС характеризуются высокой гидрофильностью, поэтому введение их в ППУ, а также увеличение количества введенного ПС закономерно повышает влагопоглощение этих образцов по сравнению с ППУ-матрицей.

Объемный вес и паропроницаемость — важные характеристики ППУ, определяющие направления их применения и напрямую зависящие от морфологических особенностей ячеек. Поэтому нами определены морфологические характеристики ячеек ППУ. Полученные изо-

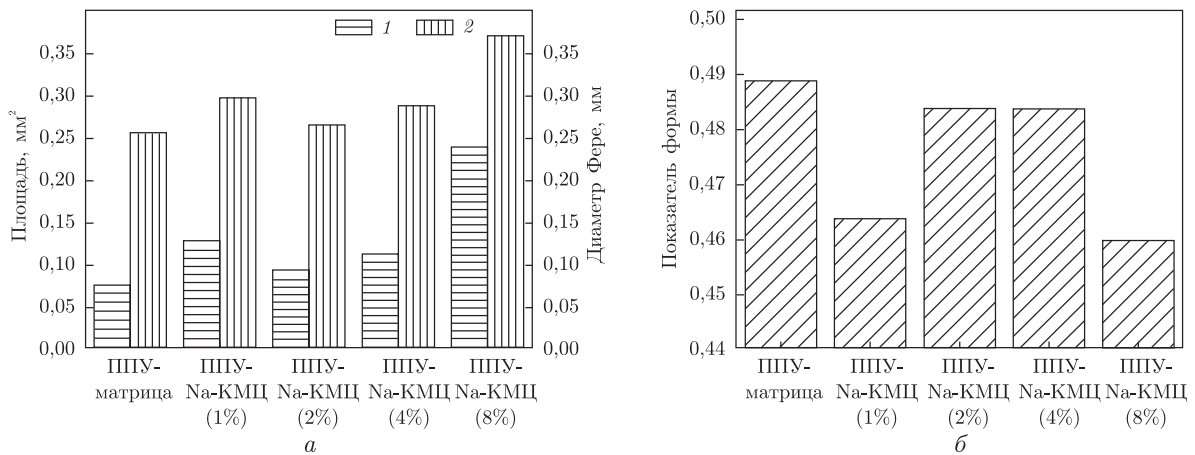


Рис. 1. Диаграммы: *a* — средние значения площади (1), диаметр Фере (2); *б* — показатель формы ячеек в ППУ с разным содержанием Na-KMЦ

бражения структуры ячеек образцов ППУ-матрицы, ППУ-Na-KMЦ (от 1 до 8%), а также с 2%-м содержанием различных ПС (Na-Ал, Кр, Na-KMЦ) были обработаны методом компьютерного анализа изображений и в результате определены статистические показатели ячеек.

Из диаграмм средних значений площади и диаметра Фере (рис. 1, *a*) видно, что введение в ППУ от 1 до 8% Na-KMЦ приводит к росту всех размерных характеристик ячеек. Для ППУ-Na-KMЦ (1%) наблюдается локальный максимум указанных характеристик. Наибольшее среднее значение показателя формы (ПФ) ячеек наблюдается для ППУ-матрицы (см. *б* на рис. 1). Введение Na-KMЦ уменьшает этот показатель, т. е. увеличивается количество анизометричных ячеек. Для образца ППУ-Na-KMЦ (8%) наблюдаются как наибольшие значения средних размерных характеристик ячеек, так и наименьшие значения ПФ. Показатели объемного веса и паропроницаемости изученных образцов (см. табл. 1) увеличиваются при увеличении размерных характеристик ячеек и уменьшении ПФ.

Таблица 1. Физико-механические показатели полученных ППУ

Образец ППУ	Объемный вес, кг/м ³	Разрушающее напряжение, кПа	Относительное удлинение, %	Влагопоглощение, %	Паропроницаемость, мг/см ² ·ч
ППУ-матрица	48	183,0	139,3	0,027	3,53
ППУ-Na-Ал (2%)	61	150,0	128,3	0,848	5,26
ППУ-Na-Ал (4%)	58	164,0	128,3	0,932	5,56
ППУ-Na-Ал (8%)	60	172,7	124,3	1,682	4,16
ППУ-Na-Ал (16%)	65	175,3	124,0	1,908	4,52
ППУ-Na-KMЦ (1%)	54	158,0	126,3	0,963	4,49
ППУ-Na-KMЦ (2%)	52	160,7	124,3	1,473	4,44
ППУ-Na-KMЦ (4%)	53	168,0	124,3	1,768	4,46
ППУ-Na-KMЦ (8%)	65	178,7	122,0	1,960	5,16
ППУ-Кр (2%)	66	160,0	126,7	1,017	4,95
ППУ-Кр (4%)	67	165,3	123,0	1,188	4,60
ППУ-Кр (8%)	65	175,3	122,3	1,349	5,07
ППУ-ГЭЦ (2%)	51	135,3	118,7	1,090	4,56
ППУ-ГЭЦ (4%)	56	152,7	125,0	1,217	4,46
ППУ-ГЭЦ (8%)	57	171,3	124,7	1,311	4,49

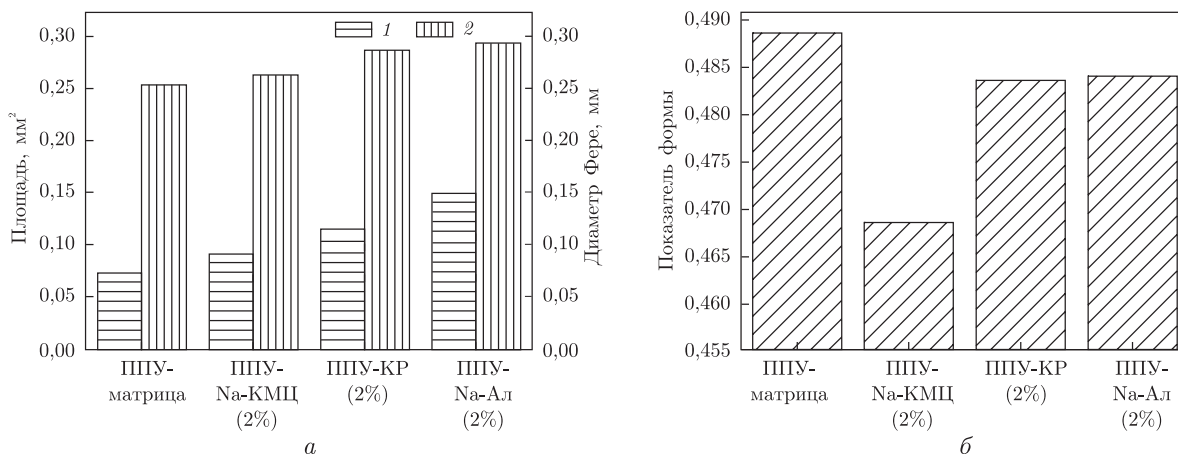


Рис. 2. Диаграммы: *а* — средние значения площади (1), диаметр Фере (2); *б* — показатель формы ячеек в ППУ, модифицированного различными ПС

Из рис. 2, *а* видно, что независимо от типа ПС их введение в ППУ приводит к некоторому увеличению средних размерных характеристик ячеек. В наибольшей степени это проявляется для образца с Na-Ал. Так, в сравнении с ППУ-матрицей, средняя площадь ячеек увеличивается примерно в 2 раза. Наименьшее влияние на размеры ячеек оказывает введение в ППУ Na-KMЦ. Установлено, что все изученные в работе ПС оказывают влияние на форму ячеек ППУ (см. *б* на рис. 2). Их введение приводит к снижению средних значений ПФ ячеек по сравнению с ППУ-матрицей. Наибольшее влияние на форму ячеек оказывает Кр. Его введение уменьшает среднее значение ПФ на 4%, тогда как для Na-KMЦ и Na-Ал снижение ПФ составляет 1%.

Методом ПМС был изучен процесс термической деструкции ППУ и идентифицирован состав ЛП. Анализ кривой температурной зависимости общего ионного тока выделения ЛП деструкции ППУ-матрицы показывает, что ее полное термическое разложение проходит в две стадии: первая — разложение жесткого блока (ЛП с массовыми числами: $m/z = 148$, $m/z = 174$, $m/z = 147$, $m/z = 145$, $m/z = 173$), вторая — гибкого блока ($m/z = 29$, $m/z = 31$, $m/z = 41$, $m/z = 43$, $m/z = 59$). Разложение ПС происходит в узком диапазоне температур. Следует отметить, что на кривых термодеструкции ППУ-ПС отсутствуют пики, отвечающие разложению нативных ПС, а в продуктах термодеструкции практически полностью отсутствуют характерные для их разложения ЛП, но появляются новые фрагменты с $m/z = 121$ и $m/z = 122$. Это может служить доказательством химического взаимодействия ПС с диизоцианатом. Введение ПС в ППУ повышает температуру разложения жесткого блока на 10–30 °С за счет активизации процесса образования внутри- и межмолекулярных водородных связей между гидроксилами ПС и уретановыми, и мочевиными группами ППУ, на разрушение которых требуется дополнительная энергия.

Для исследования деградации синтезированные ППУ подвергались воздействию различных факторов, моделирующих условия окружающей среды. Для этого образцы ППУ погружали в 0,1 н. растворы HCl и KOH и экспонировали в почве. Данные Δm образцов ППУ после воздействия различных деструктивных факторов (табл. 2) свидетельствуют о том, что образцы ППУ-ПС деградируют гораздо больше, чем ППУ-матрица. Уже после 1 мес. экспонирования в почве Δm образцов ППУ-ПС превышает фактическое содержание ПС в ППУ. Δm образца ППУ-матрица даже после 12 мес. экспонирования незначитель-

на (2,49%). Наиболее подвержены деградации в условиях почвы образцы ППУ-Кр (2%), ППУ-Кр (8%) и ППУ-На-Ал (2%), Δm которых после 12 мес. экспонирования составила 47,60%, 33,91% и 33,86% соответственно.

Изменения структуры образцов ППУ подверженных кислотному и щелочному гидролизу, экспонированию в почву изучали с помощью ИК спектроскопических исследований. В качестве внутреннего стандарта выбрана полоса колебаний С=C бензольного кольца ($\nu = 1603 \text{ см}^{-1}$). Анализ ИК-спектров показал, что образец ППУ-матрица более стойкий к действию данных факторов — спектры образцов до и после испытаний практически не изменились, в то время как в спектрах образцов ППУ-Кр (8%) наблюдаются изменения. Так, после проведенных испытаний падает интенсивность полосы свободных ν_{NH} и ν_{OH} ($3440\text{--}3610 \text{ см}^{-1}$). Наблюдается незначительное падение интенсивности и смещение в область меньших частот полос связанных ν_{NH} (3320 см^{-1}) (рис. 3). После действия кислой среды происходит незначительное, а после щелочной — большее падение интенсивностей полос амид I ($\nu = 1735 \text{ см}^{-1}$), амид II ($\nu = 1654 \text{ см}^{-1}$) и δ_{NH} ($\nu = 1539 \text{ см}^{-1}$). Аналогичные изменения профиля этих полос характерны и для образцов ППУ-Кр (8%) после экспонирования их в почве, причем с увеличением времени экспонирования изменения имеют более выраженный характер. Снижение интенсивности данных полос поглощения указывает на уменьшение количества уретановых связей под действием как кислой и щелочной сред, так и комплекса условий при экспонировании в почве. Изменение профиля полос после действия внешних факторов наблюдается и в области $\nu_{\text{C-OH}}$ и $\nu_{\text{C-O-C}}$. Так, после действия кислой среды уменьшается интенсивность полос при $\nu = 1080 \text{ см}^{-1}$, $\nu = 1130 \text{ см}^{-1}$ и $\nu = 1184 \text{ см}^{-1}$. После действия щелочной среды интенсивность данных полос уменьшается еще значительно. Экспонирование образцов ППУ-Кр (8%) в почве вызывает аналогичные изменения профиля данных полос. Эти изменения становятся более выраженными с увеличением времени экспонирования. На основании изложенного можно сделать вывод о том, что введение Кр инициирует процесс фрагментации ППУ за счет “разрыхления” структу-

Таблица 2. Потеря массы образцами ППУ после действия различных факторов, моделирующих процессы окружающей среды

Образец ППУ	Потеря массы после гидролиза, %		Потеря массы после экспонирования в почве, %				
	0,1 н. раствор HCl	0,1 н. раствор KOH	1 мес.	3 мес.	6 мес.	9 мес.	12 мес.
ППУ-матрица	2,34	8,49	2,13	2,15	2,15	2,42	2,49
ППУ-На-Ал (2%)	16,67	26,12	8,93	16,40	26,38	32,87	33,86
ППУ-На-Ал (4%)	22,52	14,25	4,07	7,82	13,87	14,14	17,09
ППУ-На-Ал (8%)	5,92	17,88	5,21	11,09	13,91	15,26	16,03
ППУ-На-Ал (16%)	8,60	28,80	13,90	18,70	25,77	27,72	28,95
ППУ-На-КМЦ (1%)	6,36	9,03	10,17	10,60	13,80	21,92	22,64
ППУ-На-КМЦ (2%)	6,52	10,55	8,64	10,21	13,54	19,29	20,55
ППУ-На-КМЦ (4%)	5,80	8,67	5,87	8,00	12,27	14,47	19,63
ППУ-На-КМЦ (8%)	6,89	10,91	9,39	13,80	14,66	16,83	21,64
ППУ-Кр (2%)	6,75	9,83	23,45	31,24	40,11	45,81	47,60
ППУ-Кр (4%)	5,64	7,49	11,43	18,42	24,36	24,69	28,63
ППУ-Кр (8%)	11,58	18,06	14,54	19,81	18,58	28,36	33,91
ППУ-ГЭЦ (2%)	18,90	29,97	11,45	12,95	16,77	23,83	28,17
ППУ-ГЭЦ (4%)	11,24	16,83	14,64	16,02	16,66	17,02	18,58
ППУ-ГЭЦ (8%)	14,51	8,02	16,70	19,29	20,15	21,86	24,72

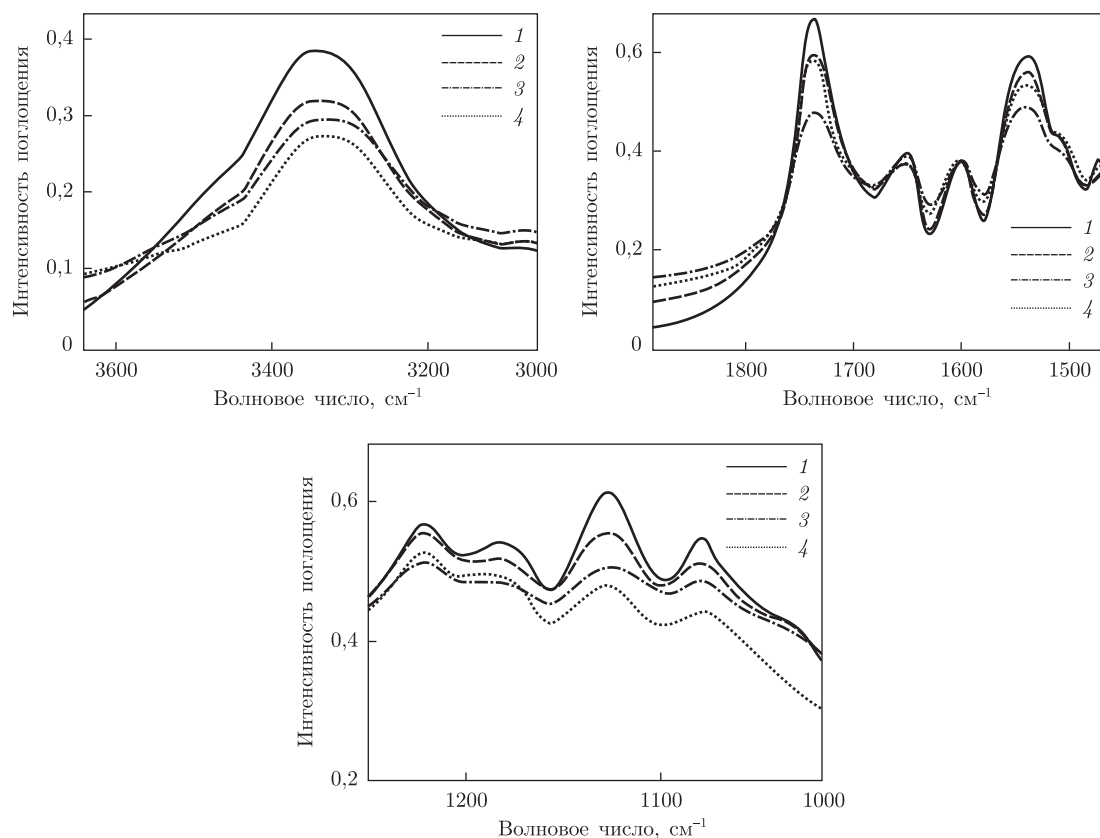


Рис. 3. Фрагменты ИК-спектров исходного ППУ-Кр (8%) (1), после выдержки его в 0,1 н. растворах HCl (2), KOH (3) и 12 мес. экспонирования в почве (4)

ры жесткого блока и облегчения доступа агентов деградации, и, следовательно, ускоряет процессы деградации под действием условий окружающей среды.

Таким образом, получены новые ППУ, в структуру которых встроены химически связанные природные ПС. Введение ПС в структуру ППУ дает возможность сохранить функциональные характеристики ППУ и придать им способность деградировать в условиях окружающей среды по окончании срока их эксплуатации.

1. Declaration on green growth. Meeting of the Council at Ministerial Level, 24–25 June 2009. – Organisation for Economic Co-operation and Development.
2. Siepmann F., Siepmann J., Walther M. et al. Polymer blends for controlled release coatings // J. Controlled release. – 2008. – 125. – P. 1–15.
3. Клемпнер Д., Сендиджаревич В. Полимерные пены и технология вспенивания. – Санкт-Петербург: Профессия, 2009. – 599 с.
4. Савельев Ю. В., Веселов В. Я., Сухорукова С. А., Брикова О. М. Гібридні полімерні системи поліуретан-полісахарид // Вопр. химии и хим. технологии. – 2003. – № 6. – С. 100–103.
5. Пат. 37345 Україна, МПК C08G18/08, C08K3/34, C08K5/03, C08K5/06 Пінополіуретановий матеріал / Ю. В. Савельєв, Л. А. Марковська, О. О. Савельєва, Н. Й. Пархоменко. – Опубл. 25.11.2008; Бюл. № 22.
6. Савельєв Ю. В., Янович І. В., Марковська Л. А. та ін. Створення нових лактозовмісних пінополіуретанів, здатних до деградації в навколишньому середовищі // Доп. НАН України. – 2011. – № 7. – С. 138–142.
7. ГОСТ 409-77. Пластмассы ячеистые и резины губчатые. Метод определения кажущейся плотности. – Введ. 25.07.77.

8. ГОСТ 29088-91. Материалы полимерные ячеистые эластичные. Определение условной прочности и относительного удлинения при разрыве. – Введ. 1.08.91.
9. ГОСТ 22900-78. Кожа искусственная и пленочные материалы. Методы определения паропрооницаемости и влагопоглощения. – Введ. 09.01.78.
10. Гонсалес Р., Вудс Р. Цифровая обработка изображений. – Москва: Техносфера, 2006. – 1072 с.
11. ImageJ: Image Processing and Analysis in Java. – <http://rsb.info.nih.gov/ij/>.
12. Хмельницкий Р. А., Лукашенко И. М., Бродский Е. С. Пиролитическая масс-спектрометрия высокомолекулярных соединений. – Москва: Химия, 1980. – 280 с.
13. Ермолович О. А., Макаревич А. В., Гончарова Е. П., Власова Г. М. Методы оценки биоразлагаемости полимерных материалов // Биотехнология. – 2005. – № 4. – С. 47–54.
14. Бабьева И. П., Зенова Г. М. Биология почв. – Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 320 с.

*Институт химии высокомолекулярных соединений НАН Украины, Киев
Киевский национальный университет технологий и дизайна*

Поступило в редакцию 16.02.2012

**Ю. В. Савельев, І. В. Янович, О. Р. Ахранович, Л. А. Марковська,
Ю. О. Будащ, О. О. Савельєва**

Пінополіуретани на основі природних полісахаридів

Синтезовано нові пінополіуретани (ППУ), у структуру яких вбудовані хімічно зв'язані природні полісахариди (ПС). Введення ПС у структуру ППУ дає змогу зберегти функціональні характеристики пінополіуретанів і надати їм здатність деградувати в умовах навколишнього середовища по закінченні терміну їх експлуатації.

**Yu. V. Savelyev, I. V. Yanovych, O. R. Akhranovych, L. A. Markovskaya,
Yu. A. Budash, O. O. Savelyeva**

Polyurethane foams based on natural polysaccharides

New polyurethane foams based on chemically bonded natural polysaccharides are synthesized. The introduction of polysaccharides into the polyurethane foam structure makes it possible to maintain the functional characteristics of a foam and gives them the ability to degrade in the environment at the end of their use.



УДК 595.384.1:575.2

© 2012

С. В. Межжерин, В. С. Костюк, Е. И. Жалай

**Аллозимные и морфологические доказательства
реальности двух симпатрических видов пресноводных
раков в пределах *Pontastacus leptodactylus* (Eschscholtz,
1823) (Decapoda: Astacidae)**

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины И. А. Акимовым)

*Проведенный аллозимный и морфометрический анализ длиннопалых раков на территории Украины доказал реальность двух достаточно массовых репродуктивно изолированных симпатрических, но при этом не симбиотических видов собственно узкопалого рака *Pontastacus leptodactylus* и угловатого рака *P. angulosus*.*

Систематика восточноевропейских обыкновенных раков подсемейства Astacinae до сих пор остается областью непонимания специалистов разных школ. С. И. Бродский [1] еще в 70-х гг. XX ст. выделил восемь видов, разбив их на два рода: широкопалых раков *Astacus* Fabricius, 1775 s. str. и длиннопалых раков *Pontastacus* (Bott, 1950). Я. И. Старобогатов через 20 лет пошел еще дальше [2, 3]. Он обосновывал наличие 14 видов, классифицировав их на три рода, выделив еще отдельно и род толстопалых раков *Caspiastacus* Starobogatov, 1995. Тогда как согласно атласу европейских речных раков [4], изданному во Франции, в восточноевропейской фауне есть только три вида, каждый из которых по своему объему соответствует роду в понимании Я. И. Старобогатова, т. е. рак широкопалый *Astacus astacus* (Linnaeus, 1758), рак узкопалый *A. leptodactylus* (Eschscholtz, 1823) и рак толстопалый *A. pachipus*. Такая кардинальная неоднозначность взглядов на систематическую структуру европейских видов в современной зоологии просто недопустима и требует специального анализа изменчивости этих видов с использованием генетических методов изучения популяций. При этом особые противоречия вызывает самый политипичный род *Pontastacus*. Детальному исследованию этой группы в пределах Украины на уровне аллозимов и морфометрии и посвящена данная работа.

С территории Украины путем морфометрии, осуществленной по схеме из 21 промера [5], и аллозимного анализа 18 локусов исследовано 37 выборок в общей сложности 445 особей раков.

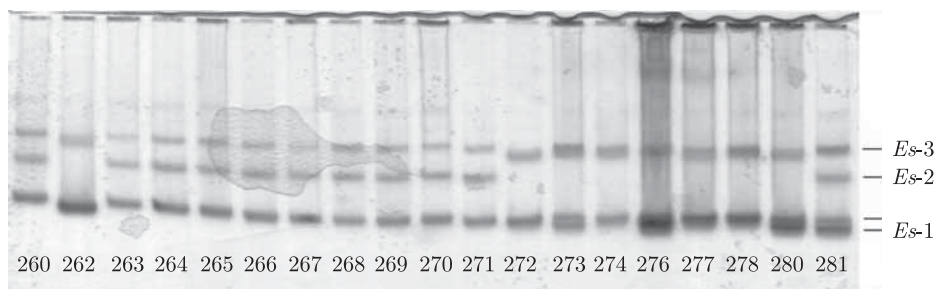


Рис. 1. Аллозимная изменчивость локусов неспецифических эстераз у разных видов длиннопалых раков: особи №№ 262, 272–280 принадлежат к *P. leptodactylus*, а №№ 260, 263–271, 281 — к *P. angulosus*. Материал взят: № 260 — Волынская обл., г. Камень-Каширский; №№ 262–271 — Житомирская обл., Овручский р-н, с. Антоновичи, №№ 272–278 и №№ 280–281 — Володар-Волынский р-н, с. Давыдовка

Аллозимный анализ доказывает, что исследованные выборки можно разделить на две генетические репродуктивно изолированные группы. Ведущим признаком при этом являются аллельные варианты локуса *Es-2* (рис. 1). Для одной из групп характерен тип *Es-2*¹⁰⁰, а для другой — *Es-2*¹¹⁰. В последнем случае аллельный продукт, вероятнее всего, перекрывается с продуктом локуса *Es-3*, инвариантного у этих видов.

Кроме того, эти две группы выборок достоверно отличаются друг от друга частотами трех полиморфных локусов (табл. 1). Следует сказать, что поскольку ареалы видов широко перекрываются (рис. 2), то такие устойчивые отличия в частотах между двумя группами популяций могут формироваться только в одном случае — при достаточно надежной репродуктивной изоляции этих двух групп популяций раков.

Анализ изменчивости, как абсолютных промеров тела, так и индексов с помощью теста ANOVA, показал в высшей степени достоверные различия между этими группами по целому ряду признаков (табл. 2). Эти генетические формы отличаются по промерам и индексам клешней и ряду параметров головогруды. При этом основными диагностирующими признаками являются форма и размер клешней. Особи одной группы характеризуются длинными и узкими клешнями, особи второй — короткими широкими. Эти особенности морфологии каждой из форм хорошо видны визуально (рис. 3) и соответствуют диагнозам двух таксонов: первая номинативному длиннопалому раку *P. leptodactylus*, а вторая угловатому раку, таксономический статус которого достаточно спорный. С. И. Бродский рассматривал его только как форму номинативного подвида *P. l. leptodactylus* forma *angulosus*, тогда как Я. И. Старобогатов — в качестве отдельного вида *P. angulosus* (Rathke, 1837). К этому следует добавить, что таким же образом, придав статус видов, он поступил еще и с целым

Таблица 1. Средняя частота аллелей полиморфных локусов (*M*) и пределы их изменчивости (*Lim*) в двух группах выборок узкопалых раков

Локус	Аллели	Группа 1 (<i>A. leptodactylus</i>) (<i>n</i> =20)		Группа 2 (<i>A. angulosus</i>) (<i>n</i> =17)	
		<i>M</i>	<i>Lim</i>	<i>M</i>	<i>Lim</i>
<i>Es-2</i>	110	0	0	1	1
<i>Es-1</i>	105	0,072 ± 0,028	0–0,4	0,616 ± 0,039	0,39–1
<i>Aat-1</i>	85	0,707 ± 0,086	0–1	0,954 ± 0,064	0,83–1
<i>Aat-2</i>	100	0,992 ± 0,007	0,86–1	0,504 ± 0,049	0,06–0,88

Примечание. Локусы: *Alb*, *Es-3*, *Idh-1*, *Idh-2*, *Ldh-1*, *Ldh-2*, *Mdh-1*, *Mdh-2*, *Me-1*, *Pgdh*, *Pt-1*, *Pt-2*, *Pt-3*, *Xdh* были инвариантными; *n* — число выборок.

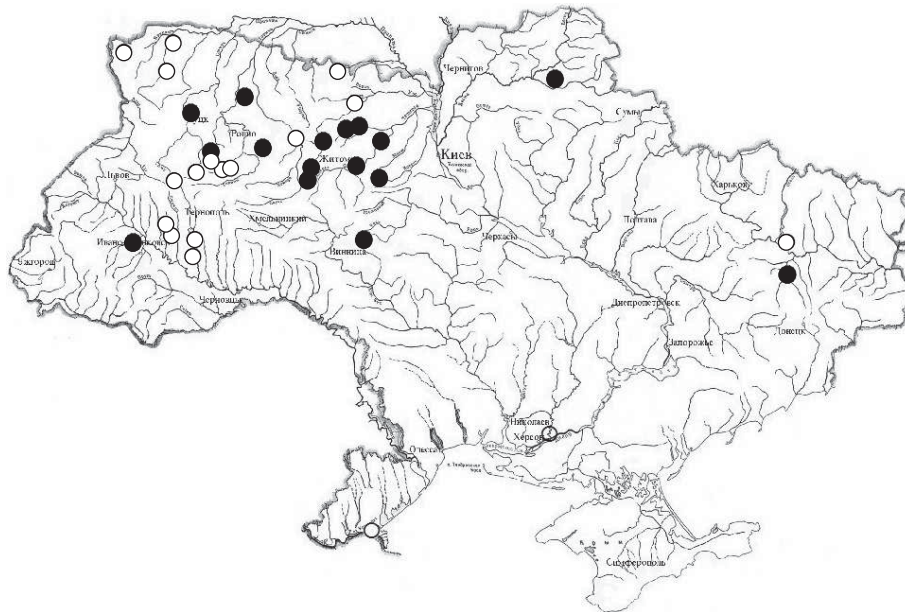


Рис. 2. Места выборки двух видов раков: *P. leptodactylus* (черные кружки), *P. angulosus* (белые кружки)

рядом подвидов длиннопалого рака. Однако остальные новации этого исследователя в данной работе не получили подтверждения.

Таким образом, полученные результаты доказывают существование в пределах Украины двух распространенных и массовых видов рода *Pontastacus*. Причем особи этих видов избегают образовывать совместные поселения (исключение — случай находки единственной особи длиннопалого рака в выборке угловатого в Овручском районе в окрестностях с. Антоновичи), за счет чего, вероятнее всего, эти виды репродуктивно достаточно хорошо

Таблица 2. Средние значения (M), пределы изменчивости (Min, Max) и стандартное отклонение (SD) ряда морфометрических признаков, отличающихся у двух форм узкопалых раков на высшем уровне достоверности (F — критерий Фишера, p — достоверность)

Признаки	Группа 1 (<i>A. leptodactylus</i>) $n = 234$				Группа 2 (<i>A. angulosus</i>) $n = 191$				F	p
	M	Min	Max	SD	M	Min	Max	SD		
LCP , мм	13,29	6	28	3,23	12,31	8	20	2,39	12,2	0,0004
ABW , мм	25,97	15	42	4,65	24,16	15	35	3,95	18,3	0,000...
LCP/CLL	0,36	0,292	0,429	0,022	0,353	0,3	0,414	0,018	10,2	0,0015
CLW/CLL	0,379	0,267	0,528	0,04	0,391	0,267	0,459	0,032	10,4	0,0014
HEL/TL	0,191	0,171	0,216	0,084	0,196	0,179	0,250	0,009	34,1	0,000...
TEW/TL	0,124	0,104	0,143	0,061	0,127	0,112	0,147	0,058	37,2	0,000...
ABW/TL	0,245	0,183	0,371	0,0292	0,234	0,192	0,301	0,021	21,4	0,000...
CEW/TL	0,181	0,134	0,257	0,009	0,185	0,097	0,219	0,095	25,0	0,000...
CDW/TL	0,253	0,227	0,292	0,012	0,257	0,235	0,367	0,014	14,7	0,0001
ABH/TL	0,11	0,091	0,133	0,008	0,113	0,096	0,136	0,007	15,6	0,0001

Примечание. Признаки: TL — общая длина тела, CLL — длина клешни, LCP — длина неподвижной части клешни, CLW — ширина клешни, HEL — длина головной части карапакса, TEW — ширина тельсона, ABW — ширина абдомена, CEW — ширина задних краев карапакса, CDW — ширина карапакса по цервикальной борозде, ABH — высота абдомена. n — число особей.



P. leptodactylus



P. angulosus

Рис. 3. Внешний вид номинативного длиннопалого рака *P. leptodactylus* (Житомирская обл., Овручский р-н, с. Антоновичи, р. Сколобов, $TL = 101$ мм, ♀) и угловатого рака *P. angulosus* (Житомирская обл., Барановский р-н, с. Довбыш, $TL = 131$ мм, ♀)

изолированы. Хотя и исключить ограниченную интрогрессивную гибридизацию в данном случае из-за особенностей генных различий не представляется возможным.

1. Бродский С. Я. Речные раки (*Crustacea, Astacidae*) Советского Союза. Сообщение 3. Распространение речных раков рода *Astacus*, *Cambaroides* и *Austropotamobius* // Вестн. зоологии. – 1974. – № 6. – С. 48–54.
2. Старобогатов Я. И. Систематика и географическое распространение речных раков Азии и Восточной Европы (*Crustacea Decapoda Astacoidei*) // *Arthropoda selecta*. – 1995. – 4, № 3–4. – Р. 3–25.
3. Старобогатов Я. И. Отряд Decapoda // Определитель пресноводных беспозвоночных России и сопредельных территорий. Т. 2. Ракообразные. – Санкт-Петербург: Наука, 1995. – С. 174–184.
4. *Atlas of Crayfish in Europe* / Eds. C. Souty-Grosset, D. M. Holdich, P. Y. Noël, J. D. Reynolds, P. Hafner. – Paris: Muséum national d'Histoire naturelle (Patrimoines naturels), 2006. – 64 p.
5. Sint D., Dalla Via J., Füreder L. Phenotypical characterization of indigenous freshwater crayfish populations // *J. Zool.* – 2007. – 273, Iss. 2. – P. 210–219.

Институт зоологии им. И. И. Шмальгаузена
НАН Украины, Киев
Житомирский государственный университет
им. Ивана Франко

Поступило в редакцию 17.01.2012

С. В. Межжерін, В. С. Костюк, О. І. Жалай

Алозимні і морфологічні докази реальності двох симпатричних видів прісноводних раків у межах *Pontastacus leptodactylus* (Eschscholtz, 1823) (Decapoda: Astacidae)

*Проведений алозимний і морфометричний аналіз довгопалих раків на території України довів реальність двох достатньо масових репродуктивно ізольованих симпатричних, але при цьому не симбіотопічних видів власне вузькопалого рака *Pontastacus leptodactylus* й вуглостого рака *P. angulosus*.*

S. V. Mezhzherin, V. S. Kostyuk, E. I. Zhalay

Allozymic and morphological evidences of two sympatric species within *Pontastacus leptodactylus* (Eschscholtz, 1823) (Decapoda: Astacidae)

*Allozymic and morphometric analyses of two crayfish forms have supported the presence of two reproductive isolated sympatric but not symbiotopic species *Pontastacus leptodactylus* and *P. angulosus* within the narrow-clawed crayfish complex.*

Ю. В. Карпец, Ю. Е. Колупаев, Т. О. Ястреб,
член-корреспондент НАН Украины А. П. Дмитриев

Возможное взаимодействие сигнальных систем при индуцировании устойчивости растительных клеток к тепловому стрессу

Обработка колеоптилей пшеницы донором оксида азота (NO) нитропруссидом натрия вызывала усиление образования супероксидного анион-радикала ($O_2^{\bullet-}$) и повышение их теплоустойчивости. Этот эффект подавлялся ингибитором образования фосфатидной кислоты (бутанолом-1). При одновременной обработке колеоптилей донором NO, бутанолом-1 и кальциевым ионофором A23187 последний компенсировал угнетение бутанолом-1 NO-зависимого усиления генерации $O_2^{\bullet-}$. Установлено взаимодействие NO-синтазной, НАДФН-оксидазной, фосфатидатной и кальциевой сигнальных систем при индуцировании устойчивости колеоптилей пшеницы к тепловому стрессу.

Оксид азота (NO) — молекула со свойствами радикала, являющаяся важным компонентом каскада защитных реакций, которые участвуют в обеспечении устойчивости растений к биотическим и абиотическим стрессам [1, 2]. Эффекты NO реализуются в тесной взаимосвязи с другими сигнальными молекулами, в том числе с активными формами кислорода (АФК) [3]. Под действием NO у растений повышается активность НАДФН-оксидазы — одного из основных источников АФК [4]. АФК играют важную роль в регуляции защитных механизмов растений, они не только оказывают прямое антимикробное действие, но и являются вторичными мессенджерами НАДФН-оксидазной сигнальной системы.

Известна также способность NO повышать активность стартового фермента фосфатидатной сигнальной системы фосфолипазы D (ФЛД), что приводит к увеличению содержания фосфатидной кислоты (ФК), которая является важным вторичным мессенджером липидного сигналинга [5]. К числу белков, активируемых ФК, относится и НАДФН-оксидаза [6, 7]. Один из механизмов влияния ФК на активность НАДФН-оксидазы может быть связан с повышением активности ФК-специфичной протеинкиназы, участвующей в активации НАДФН-оксидазы, хотя наличие такого механизма доказано только для животных клеток [6]. С другой стороны, показано, что ФК в растительных клетках может функционировать как кальциевый ионофор [8] и способствовать поступлению кальция в цитозоль. Известно, что НАДФН-оксидаза относится к ферментам, регулируемым Ca^{2+} [9]. Таким образом, нельзя исключить, что влияние ФК на НАДФН-оксидазу может быть также опосредовано кальцием.

Наша цель состояла в изучении взаимодействия NO-синтазной, НАДФН-оксидазной, фосфатидатной и кальциевой сигнальных систем при индуцировании теплоустойчивости пшеницы. Для этого исследовали влияние донора NO нитропрусида натрия (НПН) на образование супероксидного анион-радикала колеоптилями пшеницы и их устойчивость к повреждающему прогреву на фоне обработки ингибитором ФЛД-зависимого образования ФК (бутанолом-1) и/или кальциевым ионофором (A23187).

В работе использовали отрезки колеоптилей, отделенные от 4-дневных этиолированных проростков пшеницы (*Triticum aestivum* L.) сорта 'Элегия'. Колеоптили пшеницы считаются

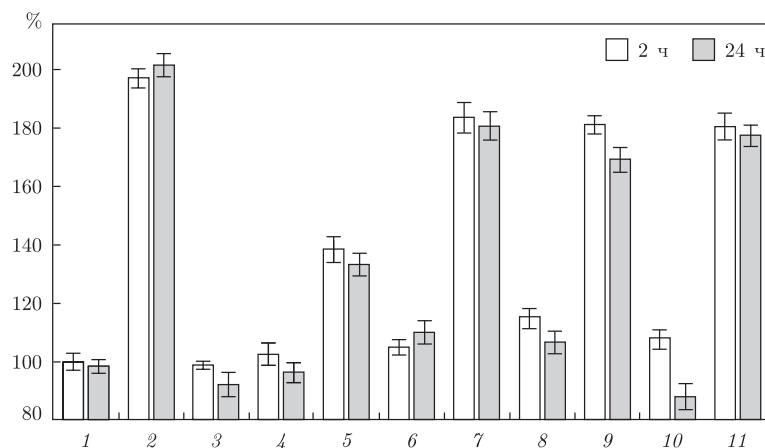


Рис. 1. Генерация супероксидного анион-радикала колеоптилями пшеницы (% к исходной величине в контроле).

Здесь и на рис. 2: 1 — контроль; 2 — НПН (500 мкМ); 3 — ФЦК (500 мкМ); 4 — бутанол-1 (0,2 %); 5 — НПН (500 мкМ) + бутанол-1 (0,2 %); 6 — бутанол-2 (0,2 %); 7 — НПН (500 мкМ) + бутанол-2 (0,2 %); 8 — A23187 (1 мкМ); 9 — НПН (500 мкМ) + A23187 (1 мкМ); 10 — бутанол-1 (0,2 %) + A23187 (1 мкМ); 11 — НПН (500 мкМ) + бутанол-1 (0,2 %) + A23187 (1 мкМ)

адекватной моделью для исследования действия экзогенных соединений на устойчивость растений, определяющуюся преимущественно клеточными механизмами [10]. Средой инкубации колеоптилей контрольного варианта служила 2% сахароза с добавлением натриевой соли пенициллина (100 тыс. ед./л). Обработку колеоптилей НПН (500 мкМ) проводили в течение 24 ч путем внесения его в указанную среду инкубации. В качестве контроля к НПН использовали его неактивный структурный аналог ферроцианид калия (ФЦК) [4]. В соответствующих вариантах опыта колеоптили обрабатывали в течение 26 ч 0,2% бутанолом-1 — ингибитором зависимого от ФЛД образования ФК либо его неактивным аналогом 0,2% бутанолом-2 [5]. В вариантах с комбинированной обработкой колеоптилей НПН и бутанолом-1 или бутанолом-2 соответствующие спирты вносили в среду инкубации колеоптилей за 2 ч до добавления в нее НПН. На среде, содержащей 1 мкМ кальциевый ионофор A23187, колеоптили инкубировали 24 ч. При исследовании комбинированного действия НПН и ионофора последний вносили в среду инкубации колеоптилей одновременно с НПН. Концентрации исследуемых соединений были выбраны по результатам предварительных опытов.

Интенсивность генерации супероксидного анион-радикала ($O_2^{\bullet-}$) оценивали по восстановлению нитросинего тетразолия [10]. Генерацию $O_2^{\bullet-}$ колеоптилями определяли через 2 и 24 ч после их обработки.

После инкубации на растворах исследуемых соединений колеоптили подвергали повреждающему прогреву в ультратермостате при 44 °С. Затем отрезки в течение 2 сут продолжали инкубировать на 2% сахарозе с добавлением пенициллина, после чего оценивали их выживание [10].

На рисунках приведены средние значения трех независимых экспериментов, каждый из которых был проведен в 3-кратной повторности, и их стандартные отклонения.

Под влиянием донора оксида азота НПН происходило 2-кратное увеличение генерации супероксидного анион-радикала колеоптилями (рис. 1). Неактивный аналог НПН ФЦК не оказывал достоверного влияния на образование $O_2^{\bullet-}$, что свидетельствует о специфичности действия НПН как донора NO.

Обработка колеоптилей антагонистом ФЛД-зависимого образования ФК бутанолом-1 существенно не влияла на генерацию супероксидного анион-радикала. Однако при этом бутанол-1 более чем на 60% снижал эффект усиления генерации $O_2^{\bullet-}$, вызываемый экзогенным NO (см. рис. 1). Бутанол-2, неактивный в отношении ингибирования образования ФК в растительных клетках, не оказывал достоверного влияния на образование супероксидного анион-радикала колеоптилями и практически не изменял эффект донора NO.

Кальциевый ионофор A23187 вызывал небольшое усиление генерации супероксидного анион-радикала, которое было достоверным только через 2 ч после начала обработки колеоптилей (см. рис. 1). В то же время при комбинированной обработке ионофор частично снимал усиление образования $O_2^{\bullet-}$, вызываемое донором NO. Особенно заметным данный эффект был через 24 ч после начала инкубации. Вероятной причиной этого могло быть избыточное накопление кальция, связанное с одновременным его поступлением с помощью ионофора и влиянием NO на потоки экстра- и внутриклеточного Ca^{2+} [11]. Избыток кальция может ингибировать взаимодействие цитозольной и мембранной субъединиц НАДФН-оксидазы и тем самым снижать ее активность [12].

В варианте с комбинированным действием ионофора A23187 и бутанола-1 уровень генерации супероксида колеоптилями не отличался от контрольного. Иным оказалось влияние кальциевого ионофора на генерацию $O_2^{\bullet-}$ при обработке им колеоптилей в комбинации с донором NO и ингибитором образования ФК бутанолом-1. В этом случае добавление ионофора в значительной степени компенсировало снятие NO-зависимого усиления генерации супероксида, вызываемое бутанолом-1 (см. рис. 1). Такой эффект косвенно указывает на то, что угнетение образования ФК, происходящее под влиянием бутанола-1, может вызывать нарушение кальциевого гомеостаза, отражающееся на процессе активации НАДФН-оксидазы оксидом азота. Не исключено, что в данном случае ионофор, усиливая поступление кальция, компенсировал недостаток ФК, которая может проявлять свою физиологическую активность в том числе и благодаря свойству кальциевого ионофора [8]. Вполне естественно, что полученные результаты не являются однозначным доказательством того, что индуцированное NO усиление генерации супероксидного анион-радикала у пшеницы связано именно с влиянием ФК на кальциевый гомеостаз клеток. Так, в системе *in vitro* показана возможность прямого влияния ФК на активность НАДФН-оксидазы [7]. Нельзя исключить, что ФК и ионы кальция влияют на активность НАДФН-оксидазы независимо друг от друга. В этом случае введение в среду инкубации колеоптилей ионофора и усиление поступления кальция в цитозоль могло частично компенсировать отсутствие активации НАДФН-оксидазы ФК, обусловленное действием бутанола-1.

Усиление генерации АФК колеоптилями пшеницы под влиянием NO рассматривается нами как эффект, необходимый для индуцирования теплоустойчивости колеоптилей. С учетом возможной зависимости активности НАДФН-оксидазы от ФК и ионов кальция представлялось целесообразным изучить влияние антагониста образования ФК бутанола-1 и кальциевого ионофора, а также их комбинаций с донором NO на устойчивость пшеницы к тепловому стрессу.

Обработка колеоптилей НПН заметно увеличивала процент их выживания после повреждающего прогрева, а неактивный аналог донора оксида азота ФЦК такого действия не оказывал (рис. 2). Бутанол-1 существенно не влиял на устойчивость колеоптилей к прогреву, но в то же время в значительной степени нивелировал повышение теплоустойчивости колеоптилей, вызываемое донором NO. Бутанол-2 не оказывал влияния на проявление эффекта донора NO на теплоустойчивость.

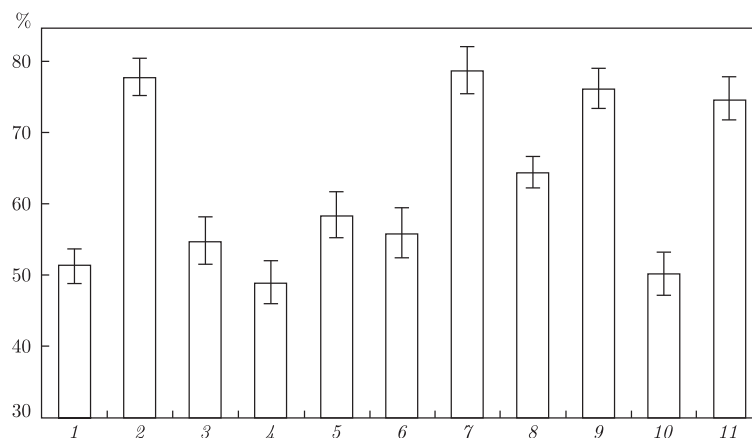


Рис. 2. Выживание (%) coleoptилей пшеницы после повреждающего нагрева (44 °С, 10 мин)

Кальциевый ионофор A23187 сам по себе незначительно, но достоверно, повышал теплоустойчивость coleoptилей пшеницы (см. рис. 2). В варианте с обработкой coleoptилей кальциевым ионофором в сочетании с НПН ни аддитивности, ни антагонизма эффектов не наблюдали. При комбинированной обработке coleoptилей бутанолом-1 и ионофором их выживаемость после прогрева была на уровне контроля. В то же время обработка coleoptилей кальциевым ионофором в значительной степени компенсировала вызываемое бутанолом-1 снятие положительного влияния НПН на теплоустойчивость coleoptилей (см. рис. 2).

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о возможном взаимодействии сигнальных молекул кальциевой, НАДФН-оксидазной и NO-синтазной сигнальных систем при индуцировании устойчивости пшеницы к тепловому стрессу. Так, ФК и Ca^{2+} могут принимать участие в активации НАДФН-оксидазы и усилении генерации АФК, которые, по-видимому, участвуют в трансдукции сигнала NO к факторам регуляции транскрипции защитных генов.

Одним из механизмов взаимодействия NO-синтазной и НАДФН-оксидазной сигнальных систем может быть предварительная активация оксидом азота ФЛД, вызывающая накопление ФК. Последняя может индуцировать транспорт ионов Ca^{2+} по градиенту концентрации, т. е. обладает функцией кальциевого ионофора. Как известно, ФК может активировать и фосфолипазу С (ФЛС) [13], стартовый фермент кальциевой сигнальной системы [14]. Такие эффекты, вызывающие повышение концентрации кальция, могут способствовать активации НАДФН-оксидазы и усилению генерации АФК, выполняющих роль вторичных мессенджеров и для NO-синтазной сигнальной системы.

С другой стороны, влияние ФК и ионов Ca^{2+} на генерацию АФК, индуцируемую экзогенным оксидом азота, может происходить и независимыми путями. Имеются сведения, указывающие на возможность прямой активации НАДФН-оксидазы ионами кальция [12] и ФК [7]. Наконец, следует отметить, что усиление образования ФК в растительных клетках под влиянием NO может происходить не только за счет активации ФЛД, но и за счет повышения активности ФЛС, образования диацилглицерола и последующего его фосфорилирования диацилглицеролкиназой [15]. При этом продукты реакций, катализируемых ФЛД и ФЛС, могут оказывать влияние на кальциевый гомеостаз. С другой стороны, эти же ферменты могут активироваться ионами кальция [14]. Таким образом, между различными сигнальными системами клеток растений существуют прямые и обратные связи, обеспе-

чиваючі їх взаємодіє для розвитку стійкості до біотических і абіотических стресам.

1. *Дмитрієв А. П.* Сигнальна роль оксиду азоту у рослин // Цитологія і генетика. – 2004. – **38**, № 4. – С. 67–75.
2. *Zhang L., Zhou S., Xuan Y. et al.* Protective effect of nitric oxide against oxidative damage in *Arabidopsis* leaves under ultraviolet-B irradiation // J. Plant Biol. – 2009. – **52**. – P. 135–140.
3. *Wilson I. D., Neill S. J., Hancock J. T.* Nitric oxide synthesis and signalling in plants // Plant Cell Environ. – 2008. – **31**. – P. 622–631.
4. *Tewari R. K., Hahn E. J., Paek K. Y.* Function of nitric oxide and superoxide anion in the adventitious root development and antioxidant defence in *Panax ginseng* // Plant Cell Rep. – 2008. – **27**. – P. 563–573.
5. *Lanteri M. L., Laxalt A. M., Lamattina L.* Nitric oxide triggers phosphatidic acid accumulation via phospholipase D during auxin-induced adventitious root formation in Cucumber // Plant Physiol. – 2008. – **147**. – P. 188–198.
6. *Wang X.* The role of phospholipase D in signaling cascades // Ibid. – 1999. – **120**. – P. 645–652.
7. *Sang Y., Cui D., Wang X.* Phospholipase D and phosphatidic acid-mediated generation of superoxide in *Arabidopsis* // Ibid. – 2001. – **126**. – P. 1449–1458.
8. *Медведев С. С., Танкемон О. В., Батов А. Ю. и др.* Ионофорные функции фосфатидной кислоты в растительной клетке // Физиология растений. – 2006. – **53**, № 1. – С. 45–53.
9. *Sagi M., Fluhr R.* Production of reactive oxygen species by plant NADPH oxidases // Plant Physiol. – 2006. – **141**. – P. 336–340.
10. *Карпец Ю. В., Колупаев Ю. Е., Швиденко Н. В.* Замедление процесса гибели клеток в сегментах coleoptiles пшеницы, инкубируемых на растворе сахарозы // Физиология и биохимия культ. растений. – 2011. – **43**, № 6. – С. 513–519.
11. *Besson-Bard A., Pugin A., Wendehenne D.* New insights into nitric oxide signaling in plants // Annu. Rev. Plant Biol. – 2008. – **59**. – P. 21–39.
12. *Глянько А. К., Ищенко А. А.* Структурные и функциональные особенности НАДФН-оксидазы растений (обзор) // Прикл. биохимия и микробиология. – 2010. – **46**, № 5. – С. 509–518.
13. *Ryu S. B., Wang X.* Increase in free linolenic and linoleic acids associated with phospholipase D-mediated hydrolysis of phospholipids in wounded castor leaves // Biochim. Biophys. Acta – 1998. – **1393**. – P. 193–202.
14. *Тарчевский И. А.* Сигнальные системы клеток растений. – Москва: Наука, 2002. – 294 с.
15. *Laxalt A. M., Raho N., Ten Have A., Lamattina L.* Nitric oxide is critical for inducing phosphatidic acid accumulation in xylanase-elicited tomato cells // J. Biol. Chem. – 2007. – **282**. – P. 21160–21168.

Харьковский национальный аграрный университет им. В. В. Докучаева
Институт клеточной биологии и генетической инженерии НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 02.02.2012

Ю. В. Карпец, Ю. Є. Колупаєв, Т. О. Ястреб,
член-кореспондент НАН України **О. П. Дмитрієв**

Можлива взаємодія сигнальних систем при індукуванні стійкості рослинних клітин до теплового стресу

Обробка coleoptilів пшениці донором оксиду азоту (NO) нітропрусидом натрію викликала посилення утворення супероксидного аніон-радикала ($O_2^{\bullet-}$) і підвищення їх теплостійкості. Цей ефект пригнічувався інгібітором утворення фосфатидної кислоти (бутанолом-1). У разі одночасної обробки coleoptilів донором NO, бутанолом-1 і кальцієвим іонофором A23187 останній компенсував пригнічення бутанолом-1 NO-залежного посилення генерації $O_2^{\bullet-}$. Встановлено взаємодію NO-синтазної, НАДФН-оксидазної, фосфатидатної і кальцієвої сигнальних систем при індукуванні стійкості coleoptilів пшениці до теплового стресу.

Yu. V. Karpets, Yu. Ye. Kolupaev, T. O. Yastreb,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **O. P. Dmitriev**

**Possible interaction of signal systems at the induction of plant cells
resistance to heat stress**

Treatment of wheat coleoptiles with nitrogen oxide (NO) donor sodium nitroprusside increases the superoxide anion-radical ($O_2^{\bullet-}$) generation and the coleoptiles resistance to heat stress. This effect is suppressed by the inhibitor of phosphatidic acid formation (butanol-1). At the combined treatment of coleoptiles with the NO donor, butanol-1, and calcium ionophore A23187, the last one compensated a suppression of the NO-dependent increase of $O_2^{\bullet-}$ generation caused by butanol-1. The interaction of NO-synthase, NADPH-oxylase, phosphatidate, and calcium signal systems at the induction of the wheat coleoptiles resistance to heat stress is established.

О. М. Клименко, О. О. Сиваш,
член-кореспондент НАН України Є. Л. Кордюм

Пластичність фотосинтетичного апарату листків гетерофільної рослини *Nuphar lutea* (L.) Smith.

*Наведено дані щодо ультраструктури хлоропластів, вмісту пігментів та флуоресценції хлорофілу в придонних, плаваючих та наземних листках *Nuphar lutea* (L.) Smith. Відмінності цих ознак у листках різного типу розглядаються як прояв фенотипічної пластичності, що визначається в першу чергу інтенсивністю світла та співвідношенням спектральних компонент сонячного світла і забезпечує процес фотосинтезу в різних умовах освітлення.*

Фенотипічна пластичність — здатність геному змінювати експресію і реалізуватися у різних фенотипах у відповідь на різноманітні зовнішні впливи, є фундаментальною властивістю живих систем, що забезпечує їх пристосування до часових та просторових варіацій зовнішнього середовища. Фенотипічний прояв змін у генній експресії визначається вже на рівні транскрипції і охоплює надзвичайно широке коло екологічно важливих ознак будови, росту, розвитку та репродукції рослинних організмів. До проявів фенотипічної пластичності у рослин на популяційному та видовому рівнях А. D. Bradshaw [1] відніс, зокрема, гетерофілію у водних рослин — наявність на одній рослині різних за формою листків — та зміни структури фотосинтетичного апарату при адаптації до флуктуацій оточуючого середовища. Підкреслюється необхідність подальших досліджень фотосинтезу у різних за екологією рослин для розуміння їх здатності пристосовуватися до варіацій освітлення в процесі росту [2]. Гетерофільні повітряно-водні та справжні водні рослини є зручними моделями для вивчення пластичності фотосинтетичного апарату, оскільки їхні листки знаходяться як у повітряному, так і водному середовищах, які розрізняються, в першу чергу, за кількістю світла та доступного CO_2 . Зменшення кількості світла виникає за рахунок відбиття сонячних променів від поверхні водойми та поглинання частини променів розчиненими органічними речовинами та планктонними організмами під час проходження крізь товщу води, що призводить до зміни співвідношення спектральних компонент сонячного світла [3].

Серед справжніх водних гетерофільних рослин зручним об'єктом для вивчення пластичності фотосинтетичного апарату є *Nuphar lutea* (L.) Smith. (глечики жовті), яка має плаваючі на поверхні води листки з довгими черешками та листки з короткими черешками, що формують розетку на дні водойми (придонні листки). Крім того, при зниженні рівня води утворюється суходільна форма [4], листки якої мають короткі черешки та зібрані в розетку (наземні листки). В літературі висвітлено морфологію, анатомічну будову та певні показники функціонального стану фотосинтетичного апарату плаваючих і підводних листків *N. lutea* в різних умовах освітлення та концентрації CO_2 [2, 5, 6], проте відомості щодо тонкої будови їх хлоропластів відсутні. Тому ми вперше провели порівняльне дослідження ультраструктури хлоропластів, складу пігментів та флуоресценції хлорофілу зрілих придонних, плаваючих та наземних листків цього виду, результати якого викладено в роботі.

Матеріал для дослідження збирали на р. Псел поблизу смт Велика Багачка Полтавської області. Придонні листки брали на глибині 0,5 та 1,5 м, наземні — з рослин, які росли на

відстані 2 м від води. Для електронно-мікроскопічних досліджень ділянки мезофілу розміром $0,5 \times 1$ см, які вирізали із середини листової пластинки, фіксували 2,5 % розчином глютарового альдегіду та 1 % розчином OsO_4 , зневоднювали в серії спиртів і окисі пропілену та заливали в суміш епон-аралдит за загальноприйнятою методикою. Зрізи завтовшки 55–70 нм виготовляли на мікротомі RMC MT-XL (США) та досліджували в електронному трансмісійному мікроскопі JEM 1230EX. Негативні зображення сканували і отримані цифрові зображення аналізували за допомогою програмного забезпечення UTHSCSA Image Tool 3.0. На знімках вимірювали лінійні розміри хлоропластів та підраховували кількість тилакоїдів у гранах.

Флуоресценцію хлорофілу вимірювали за допомогою флуорометра ХЕ-РАМ (“Walz”, Німеччина). Мінімальний рівень флуоресценції (F_0) в адаптованих до темряви (протягом 5 хв) листках визначали при дії модульованого вимірюючого світла низької інтенсивності ($0,1 \text{ мкмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$). Максимальний рівень флуоресценції в адаптованих до темряви (F_m) та світла (F'_m) листках визначали при дії короткого насичуючого імпульсу (1 с) галогенової лампи інтенсивністю $5000 \text{ мкмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Максимальний (F_v/F_m) та ефективний (F'_v/F'_m) квантові виходи, фотохімічне (qP) та нефотохімічне (qN) гасіння розраховували за формулами Maxwell [7]. Параметри флуоресценції хлорофілу вимірювали при дії активнічного світла 60, 200, 500 і $1000 \text{ мкмоль} \cdot \text{м}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Пігменти (хлорофіл і каротиноїди) екстрагували 80% ацетоном. Вимірювання проводили на спектрофотометрі Specord M40. Концентрацію та вміст хлорофілу визначали за Lichtenthaler, Buschmann [8].

Проведені дослідження показали, що хлоропласти клітин ізолатерального мезофілу (мезофіл не диференційований на палисадну та губчасту паренхіму) придонних листків, які знаходяться на глибині 0,5 та 1,5 м, розташовуються вздовж периклінальних стінок клітин, мають видовжену форму, містять поодинокі пластоглобули та крохмальні зерна (рис. 1, а, з). В клітинах верхнього шару мезофілу середній об'єм хлоропластів більший за такий хлоропластів у клітинах нижнього шару і становить $(15,47 \pm 1,66) \text{ мкм}^3$ на глибині 0,5 м та $(27,81 \pm 1,74) \text{ мкм}^3$ на глибині 1,5 м, об'єм хлоропластів у клітинах нижнього шару дорівнює $(14,79 \pm 1,19) \text{ мкм}^3$ та $(16,48 \pm 1,12) \text{ мкм}^3$ відповідно. Хоча середня кількість тилакоїдів на грану майже однакова в листках з різних глибин і коливається від $8,3 \pm 0,57$ до $8,82 \pm 0,66$, відмінності між листками полягають у частоті зустрічальності гран з кількістю тилакоїдів від 30 і вище, причому саме для листків з глибини 1,5 м характерна наявність гран, які складаються з 36–44 тилакоїдів (рис. 1, б, в, д, е). В клітинах палисадної паренхіми дорзовентрального мезофілу плаваючих і наземних листків хлоропласти лінзоподібної форми розташовуються вздовж антиклінальних стінок, містять пластоглобули та крохмальні зерна (рис. 2, а, б). Хлоропласти придонних, плаваючих та наземних листків розрізняються за кількістю тилакоїдів на грану: грани хлоропластів придонних листків складаються в середньому з $8,62 \pm 0,62$ тилакоїдів, плаваючих листків — з $2,63 \pm 0,12$, наземних листків — з $3,42 \pm 0,15$.

Вміст хлорофілу *a* найвищий у придонних листках з глибини 1,5 м і становить $(9,56 \pm 1,12) \text{ мг/г}$ сухої речовини, найнижчий — у плаваючих листках — $(4,66 \pm 1,32) \text{ мг/г}$ сухої речовини, у придонних листках з глибини 0,5 м дорівнює $(8,16 \pm 0,79) \text{ мг/г}$ сухої речовини, у наземних — $(7,95 \pm 0,78) \text{ мг/г}$ сухої речовини. Така ж тенденція виявлена щодо вмісту каротиноїдів, який вищий у придонних листках і становить $(2,68 \pm 0,30) \text{ мг/г}$ сухої речовини в зразках з глибини 1,5 м і $(2,44 \pm 0,13) \text{ мг/г}$ сухої речовини в зразках з глибини 0,5 м, у наземних листках — $(1,85 \pm 0,12) \text{ мг/г}$ сухої речовини та найнижчий у плаваючих листках — $(1,41 \pm 0,27) \text{ мг/г}$ сухої речовини. Співвідношення хлорофілів *a/b* коливалося від $2,41 \pm 0,04$

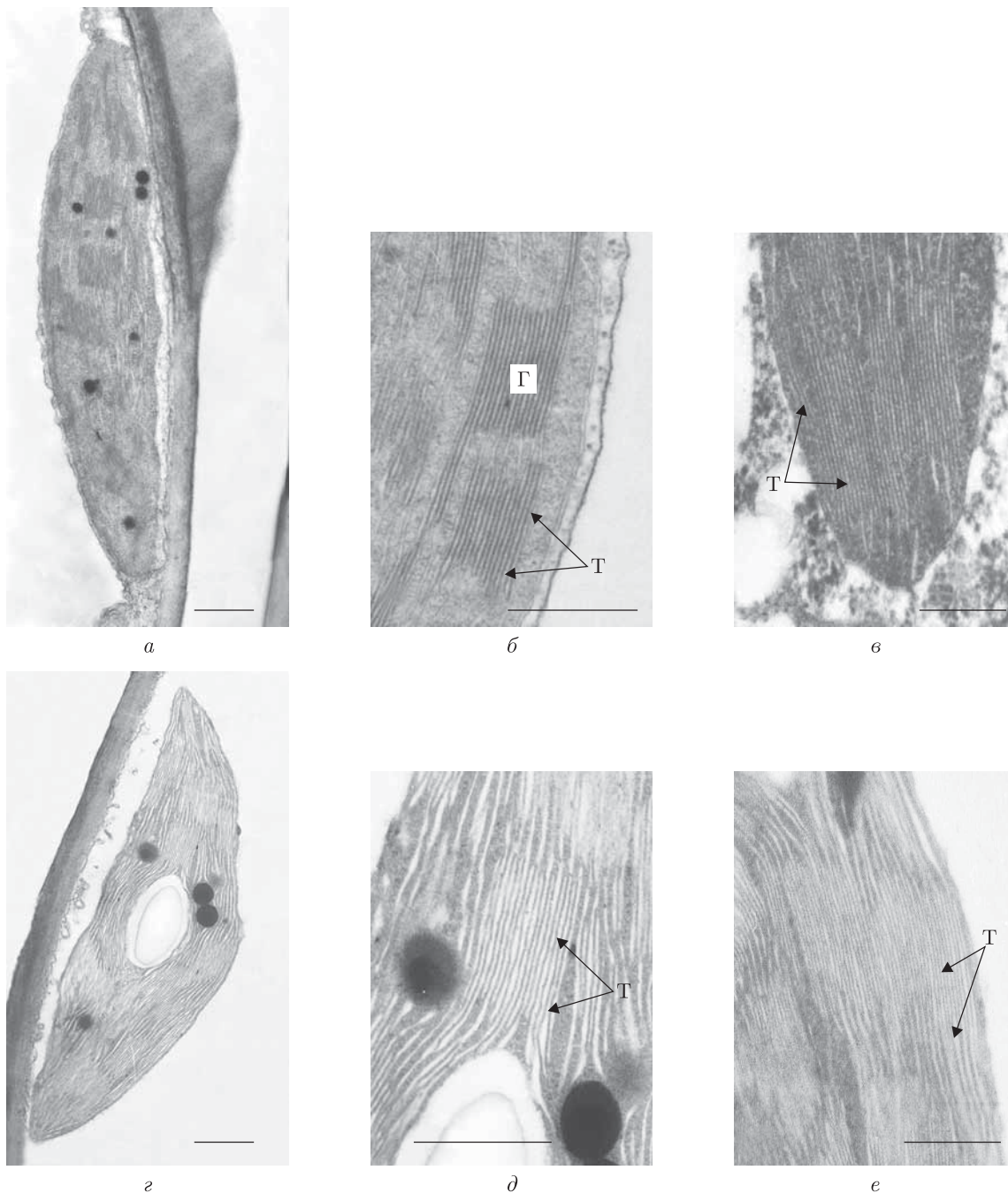


Рис. 1. Фрагменти клітин мезофілу придонних листків з глибини 0,5 м (а, б, в) та 1,5 м (з, д, е) листків *Nuphar lutea*; а, з — загальний вигляд хлоропластів; б, в, д, е — фрагменти гран хлоропластів. Г — грана; Т — тилакоїд. Масштаб 500 нм

у придонних листках до $2,88 \pm 0,08$ — у плаваючих. Нижче співвідношення хлорофілів a/b вказує на збільшення частки хлорофілу b , який повністю знаходиться в головному світлозбиральному комплексі фотосистеми II (СЗКІІ). Вважається, що співвідношення хлорофілів a/b в межах 2-2,5 та зростання розміру світлозбиральної антени відповідає значенням,

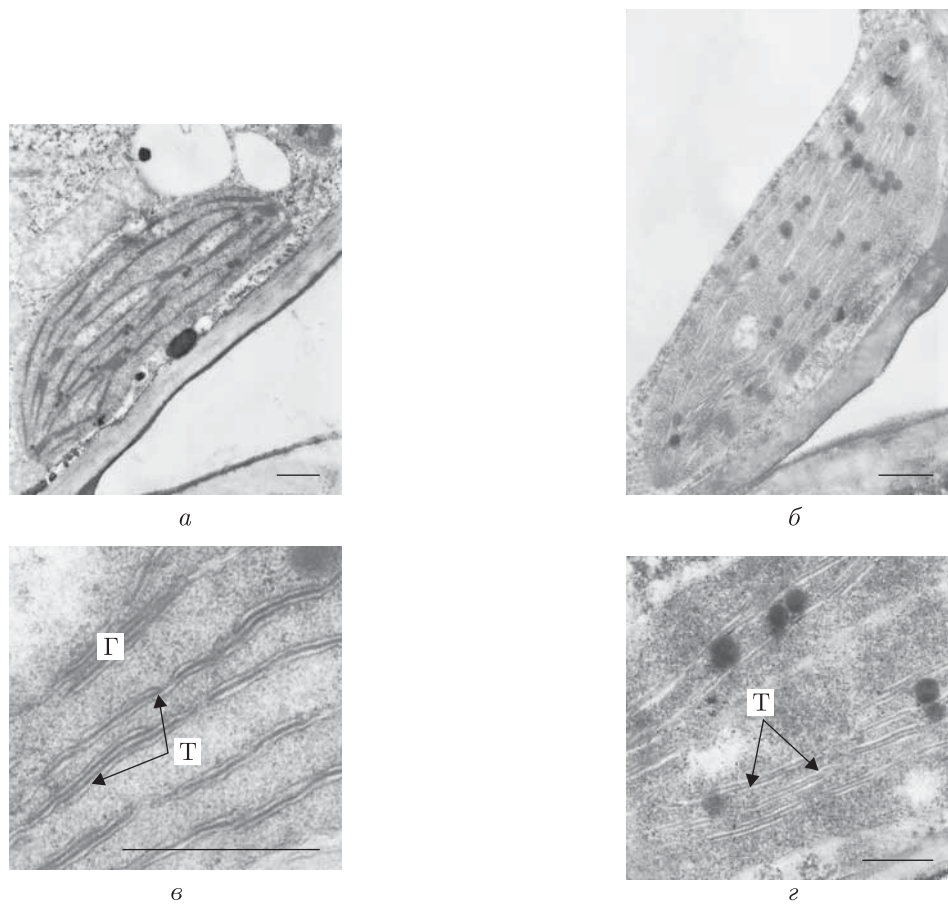


Рис. 2. Фрагменти клітин мезофілу палисадної паренхіми плаваючих (а, в) та наземних листків (б, г) листків *Nuphar lutea*; а, б — загальний вигляд хлоропластів; в, г — фрагменти гран хлоропластів. Г — грана; Т — тилакоїд. Масштаб 500 нм

характерним для рослин, що ростуть при низькій інтенсивності світла [9]. Отже, хлоропласти придонних листків незалежно від глибини водойми за розмірами та розподілом гран за кількістю тилакоїдів і вмістом пігментів близькі до хлоропластів тіньюлюбних рослин, а хлоропласти наземних та плаваючих листків — до хлоропластів світлолюбних рослин [10].

Показники максимального квантового виходу фотохімічних реакцій ФСII (F_v/F_m) придонних, плаваючих та наземних листків незначно відрізнялися. Показники ефективного квантового виходу (F'_v/F'_m) та фотохімічного гасіння (qP) були вищими у наземних та плаваючих листках за умов будь-якої густини потоку фотонів. У придонних листках, незалежно від глибини їх знаходження, значення показників F'_v/F'_m та qP різко зменшувалися при збільшенні інтенсивності актинічного світла з 60 до 200 і 1000 $\mu\text{кмоль}\cdot\text{м}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$ (табл. 1), що збігається з даними літератури для інших видів рослин [11, 5]. Значення qP , менші за 0,6 вже при інтенсивності діючого світла близько 200 $\mu\text{кмоль}\cdot\text{м}^{-2}\cdot\text{с}^{-1}$, свідчать про пристосування фотосинтетичного апарату придонних листків до низьких рівнів світлового потоку завдяки потужним світлозбиральним антенам.

Таким чином, проведений порівняльний аналіз ультраструктури хлоропластів, вмісту пігментів і флуоресценції хлорофілу придонних і плаваючих листків тієї самої рослини та листків наземної форми *N. lutea* виявив істотні відмінності досліджуваних ознак у листків

Таблиця 1. Характеристика параметрів кривих індукції флуоресценції хлорофілу придонних, плаваючих та наземних листків *N. lutea* з різної глибини, $n = 5$, $P = 0,05$, $M \pm m$

Тип листків (глибина)	Інтенсивність світла, мкмоль · м ⁻² · с ⁻¹	F_v/F_m	F'_v/F'_m	qP	qN
Придонні (0,5 м)	60	0,75 ± 0,006	0,66 ± 0,014	0,81 ± 0,001	0,39 ± 0,019
	200		0,38 ± 0,027	0,44 ± 0,044	0,85 ± 0,009
	1000		0,21 ± 0,026	0,16 ± 0,014	0,92 ± 0,290
Придонні (1,5 м)	60	0,75 ± 0,008	0,64 ± 0,018	0,82 ± 0,018	0,45 ± 0,064
	200		0,39 ± 0,027	0,42 ± 0,025	0,84 ± 0,013
	1000		0,39 ± 0,028	0,21 ± 0,050	0,82 ± 0,017
Плаваючі (0 м)	60	0,77 ± 0,022	0,71 ± 0,015	0,94 ± 0,017	0,25 ± 0,031
	200		0,69 ± 0,018	0,90 ± 0,019	0,32 ± 0,062
	1000		0,40 ± 0,226	0,67 ± 0,073	0,84 ± 0,026
Наземні	60	0,80 ± 0,007	0,74 ± 0,020	0,95 ± 0,003	0,16 ± 0,110
	200		0,67 ± 0,100	0,87 ± 0,014	0,26 ± 0,178
	1000		0,44 ± 0,040	0,68 ± 0,004	0,80 ± 0,047

різного типу, що вказує на високу фенотипічну пластичність фотосинтетичного апарату, що визначається в першу чергу інтенсивністю світла та співвідношенням спектральних компонент сонячного світла і забезпечує процес фотосинтезу в різних умовах освітлення.

1. Bradshaw A. D. Evolutionary significance of phenotypic plasticity in plants // Adv. Genet. – 1965. – **13**, No 2. – P. 115–155.
2. Hussner A., Hoelken H. P., Jahns P. Low light acclimated submerged freshwater plants show a pronounced sensitivity to increasing irradiances // Aquatic Bot. – 2010. – **93**. – P. 17–24.
3. Потапов А. А. Вопросы физиологии и экологии погруженных гигрофитов // Успехи соврем. биологии. – 1950. – **29**, № 3. – С. 429–441.
4. Дубына Д. В. Кувшинковые Украины. – Киев: Наук. думка, 1982. – 230 с.
5. Snir A., Gurevitz M., Marcus Ye. Alterations in Rubisco activity and in stomatal behavior induce a daily rhythm in photosynthesis of aerial leaves in the amphibious plant *Nuphar lutea* // Photosynth. Res. – 2006. – **90**. – P. 233–242.
6. Клименко О. М. Анатомічні особливості листків гетерофільної рослини *Nuphar lutea* (L.) Smith. // Укр. бот. журн. – 2011. – **68**, № 2. – С. 105–110.
7. Maxwell K., Johnson G. N. Chlorophyll fluorescence – a practical guide // J. Exp. Bot. – 2000. – **51**. – P. 659–668.
8. Lichtenthaler H. K., Buschmann C. Chlorophylls and Carotenoids: Measurement and Characterization by UV-VIS Spectroscopy // Current Protocols in Food Analytical Chemistry / Eds. Wrolstad R. E., Acree T. E., An H. et al. – New York: John Wiley & Sons Inc, 2001. – P. F4.3.1–F4.3.8.
9. Lichtenthaler H. K., Marek M. V., Kalina J., Urban O. Differences in pigment composition, photosynthetic rates and chlorophyll fluorescence images of sun and shade leaves of four tree species // Plant Physiol. Biochem. – 2006. – **45**. – P. 577–588.
10. Sheue C.-R., Sarafis V. Bizonoplast, a unique chloroplast in the epidermal cells of microphylls in the shade plant *Selaginella erythropus* (Selaginellaceae) // Amer. J. Bot. – 2007. – **94**, No 12. – P. 1922–1929.
11. Mommer L., Thys L., Pons E. et al. Submergence-induced morphological, anatomical, and biochemical responses in a terrestrial species affect gas diffusion resistance and photosynthetic performance // Plant Physiol. – 2005. – **139**. – P. 497–508.

Е. Н. Клименко, А. А. Сиваш,
член-корреспондент НАН Украины **Е. Л. Кордюм**

Пластичность фотосинтетического аппарата листьев гетерофильного растения *Nuphar lutea* (L.) Smith.

*Исследованы ультраструктура хлоропластов, состав пигментов и флуоресценция хлорофилла у придонных, плавающих и наземных листьев *Nuphar lutea* (L.) Smith. Отличия этих признаков у листьев разного типа рассматриваются как проявление фенотипической пластичности, которая определяется в первую очередь интенсивностью света и соотношением спектральных компонентов солнечного света и обеспечивает процесс фотосинтеза в разных условиях освещения.*

О. М. Klymenko, О. О. Sivash,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **E. L. Kordyum**

Plasticity of the photosynthetic apparatus in leaves of *Nuphar lutea* (L.) Smith. heterophyllous plants

*The data on the chloroplast ultrastructure, pigment content, and chlorophyll fluorescence in submersed, floating, and terrestrial leaves of *Nuphar lutea* (L.) Smith. are presented. The differences in these patterns in leaves of various types are considered as a display of the phenotypic plasticity, which depends, first of all, on the light intensity and the ratio of spectral lines and provides the photosynthesis under various illumination conditions.*

А. С. Кочевенко, А. Р. Ферні

Клонування та картування гена, що кодує нову позамітохондріальну ізоформу амінотрансферази культурного томата, задіяну в деградації амінокислот з розгалуженим ланцюгом

(Представлено академіком НАН України Ю. Ю. Глебою)

Ідентифіковано новий ген томата (BCAT7), що кодує нову ізоформу амінотрансфераз, задіяних у метаболізмі амінокислот з розгалуженим ланцюгом. Ген було картовано в геномному регіоні між маркерами TG71 і TG528 на хромосомі 1. Шляхом RACE-PCR встановлено повнорозмірну кодуючу нуклеотидну послідовність цього гена. Вивчено його експресію в різних типах тканин томата та визначено субклітинну локалізацію протеїну, що ним кодується.

В рослинних та тваринних організмах амінокислоти з розгалуженим ланцюгом (BCAA) лейцин, валін та ізолейцин виконують важливі регуляторні та структурні функції [1, 2]. Однак за певних умов, як то порушення процесу деградації, високий рівень біосинтезу або швидкий кругообіг білків, концентрація BCAA та їх α -кетокислотних похідних може підвищуватися у рази та сягати токсичного рівня. Катаболізм BCAA є важливим механізмом детоксифікації клітин, він забезпечує підтримання запасу цих амінокислот на певному рівні, необхідному для біосинтезу білків.

Як було встановлено в багатьох дослідженнях, процес біосинтезу BCAA відбувається в хлоропластах [3, 4], тоді як щодо локалізації процесу деградації BCAA існують суперечливі повідомлення. Дослідження, проведені в декількох лабораторіях, переконливо показали, що цілий ряд ферментів, задіяних у деградації BCAA, локалізовано в мітохондріях; подальший аналіз їх ферментативної активності та субстратної специфічності довів, що мітохондрії дійсно здатні катаболізувати BCAA [5, 6]. З іншого боку, відомо, що альфа-кетокислоти, які формуються внаслідок реакції трансамінації BCAA, можуть бути катаболізовані в пероксисомах рослин до 2-метил-пропаноїл-КоА [7, 8]. Також було виявлено, що мутація гена *CHU1* у *Arabidopsis*, який кодує пероксисомальний фермент 3-гідроксиізобутирил-КоА гідролазу, призводить до порушення катаболізму валіну [9]. Таким чином, базуючись на сучасних літературних даних, цілком правомірно припустити, що у рослин можуть існувати обидва шляхи (мітохондріальний та пероксисомальний) катаболізму BCAA або проміжні продукти пероксисомального шляху можуть бути в подальшому метаболізовані в мітохондріях.

Амінотрансферази амінокислот з розгалуженим ланцюгом (BCATs) є ключовим класом ферментів, що задіяні не тільки в біосинтезі BCAA, але і в їх деградації. Оскільки накопичення BCAA у надмірних концентраціях є токсичним, то BCATs відіграють певну роль у детоксифікації клітин. У ході попередніх досліджень нами було клоновано і картовано понад 30 генів, що кодують ферменти, задіяні в метаболізмі амінокислот з розгалуженим ланцюгом в культурному томаті. Було також встановлено, що у *Solanum lycopersicum* BCATs кодуються невеликою родиною генів. Шість членів цієї родини ідентифіковано і локалізова-

но на хромосомній карті томата за допомогою методу поліморфізму довжини рестрикційних фрагментів [10]. Метою ж проведеного дослідження було клонування, картування та характеристика гена *BCAT7*, що кодує нову ізоформу амінотрансфераз амінокислот з розгалуженим ланцюгом у томата.

Клон cLEM-6-A9, що містив кДНК *BCAT7*, було ідентифіковано в загальнодоступній TIGR Tomato EST колекції. Для визначення нуклеотидної послідовності кДНК використовували автоматичний сиквенатор ABI PRISM® 310 (PE Applied Biosystems, Німеччина) та набір BigDye Terminator Cycle Sequencing Kit. За результатами сиквенс-аналізу встановлено, що кДНК вставка має розмір 607 п. н. і містить усічену кодуючу послідовність гена *BCAT7*. Аналіз кластеру (SGN-U565 681) послідовностей, що відповідає гену *BCAT7* у базі даних SOL Genomics Network tomato EST database (<http://solgenomics.net/index.pl>; [11]), виявив, що відповідний кластер містить 24 гомологічних EST послідовностей, ізольованих в основному з насіння і незрілих зелених плодів.

Для встановлення повної кодуючої послідовності використовували метод полімеразної ланцюгової реакції з швидкою ампліфікацією кінців кДНК (RACE-PCR). 5'- та 3'-RACE виконували за допомогою набору реактивів Gene Racer Kit ("Invitrogen", Німеччина) згідно з протоколом виробника, використовуючи таку комбінацію геноспецифічного і універсального праймерів: GeneRacer 5' і 5RaceReBCAT7, 3RaceFrBCAT7 і GeneRacer 3' (табл. 1). Ампліфіковані продукти було клоновано у вектор pCR4Blunt-TOPO і сиквеновано. Визначена нуклеотидна послідовність кДНК *BCAT7* культурного томата містила кодуючу послідовність розміром 1674 п. н. і 5'-3'- нетрансльовані регіони 79 п. н. і 82 п. н. тощо (рис. 1). Білок, що кодується геном *BCAT7*, складається з 557 амінокислотних залишків і виявляє 14–16% ідентичності до амінокислотної послідовності амінотрансфераз BCAT1 *Arabidopsis thaliana* і BCAT1 та BCAT2 *Solanum lycopersicum*, що задіяні в катаболізмі амінокислот з розгалуженим ланцюгом.

Для вивчення внутрішньоклітинної локалізації нової ізоформи нуклеотидну послідовність *BCAT7* без стоп-кодону було клоновано у вектор pK7FWG2, який сконструйовано для отримання GFP-мічених протеїнів [12]. Векторну конструкцію BCAT7-GFP було введено в мезофільні протопласти *N. tabacum* за допомогою методу ПЕГ-обумовленої трансформації [13]. За даними конфокальної мікроскопії, яку застосовували для візуалізації тимчасової експресії химерного протеїну BCAT7-GFP у протопластах тютюну, встановлено, що BCAT7-GFP не локалізовано ні в хлоропластах, ні в мітохондріях (рис. 2). Беручи до уваги форму і розмір субклітинних органел, в яких було виявлено сигнал флуоресценції, ми вважаємо, що найбільш вірогідним місцем локалізації BCAT7 протеїну є пероксисоми.

Таблиця 1. Праймери, які були використані в дослідженні

Назва праймеру	Нуклеотидна послідовність
GeneRacer 5'	CGACTGGAGCACGAGGACACTGA
5RaceReBCAT7	TAACCTGGTGGGGGTCTTCCTGATT
GeneRacer 3'	GCTGTCAACGATACGCTACGTAACG
3RaceFrBCAT7	TCGAGTGTATGGCGGAAAGGTATT
FrqRTUBI3	GGTTAAGCTCGCTGTGTTGCA
ReqRTUBI3	CGAAGCCTCTGAACCTTTCCA
FrqRTBCAT7	AGAGGTCATCTTTGGTGCAGGAG
ReqRTBCAT7	GTCAAACCTGGCACACGTTGTT
FrGFPBCAT7	CACCATGGGAGAAGAAATTGAAGTGATA
ReGFPBCAT7	GTGCCATACCAACTTATGAGAAGAGC

gaaaataacatttaggcgatacattcttgactctctcaaaactcacaaaaccaagttgtgca
attcttgagctcttgata**atg**gggagaagaattgaagtgatacattcttggtctgcacc
M G E E I E V I H S W S A P
aggtcctaagcaccagcctcatgtactcttttgcccagagaaatgacatcgaagttctt
R S L S T S L M Y S F A Q R N D I E V L
gatgaaccactgtatgcaaatttttgcgagtcactggagtgatagaccttacaaggaa
D E P L Y A N F L R V T G V D R P Y K E
aaacttcgatccgaactggagaatgatggaataagggtggaagaggtcatctttggt
K L R S E L E N D G N K V V K E V I F G
gcaggagtaaagaagtatcgctactgtaagcatatagccaacaacgtgtgccaggtttg
A G V K K Y R Y C K H I A K Q R V P G L
acaaatgaattgatgaaaagaggaaagcacttcatactgataaggaaatccccctgatatc
T N E L M K R G K H F I L I R N P L D I
ttgccatcctttgacaagattgtacctccatcattcttgagctggggtggcagagctg
L P S F D K I V P P S F L E L G L A E L
gtctccgtatacagtgagttatctgaatcaggaagacccccaccagttatgatggca
V S V Y S E L S E S G R P P P V I D A A
gatcttcgtgaaaatccccgagcgcacctgctggcctttgtgaagacctgacattcca
D L R E N P E A T L R G L C E D L D I P
tttcaagattcaatgctcagtggggaagctggaccgaaaccatttgatggcatctgggca
F Q D S M L R W E A G P K P F D G I W A
ccatgtggtataaaagtgtgcataaatcaacaggttttgctccagcaaaagaataccct
P W W Y K S V H K S T G F A P A K K Y P
acgcccattccacatcattgtatgatttggaggcaaaagcctaccctttacaacatg
T P F P T S L Y D L L E Q S L P F Y N M
cttaaacgtcatgctagacgatcttcttcaattacctgaactcaactttacctcatcct
L K R H A R R S S S N Y L N S T L P H P
agtcttctgttctctgtaatgagaagctgcttgcatgggtgggtgatgagatttgct
S L P V P A N E K L L A W V G D E I V P
cgtgagactgcaaggtttcagatattgattcaattgtccaaggtggcgatggagttgg
R E T A K V S V F D S I V Q G G D G V W
gagggacttcgagtgatggcggaaggatattaagcttgaggagcatttagataggatg
E G L R V Y G G K V F K L E E H L D R M
ttcgactctgcgaaagcactagctttcagcaatgtaccaactcgcgaagaggtcaaagaa
F D S A K A L A F S N V P T R E E V K E
gctattttcaggactcttttaagaaatggaatggttgataatgcacatatccgactaac
A I F R T L L R N G M F D N A H I R L T
ttgacacgtgtgtaaaaggtaacctcaggaatgagcccagcattcaatcgttatggatgt
L T R G K K V T S G M S P A F N R Y G C
acttttaagtctctgtaatggaacctccagtatatgacaatgaaaagggcttaatg
T L I V L A E W K P P V Y D N E K G L M
ttagtgcggaaccactcgtcgtaattcaccaaataattggattcaaaagattcaccat
L V T A T T R R N S P N N L D S K I H H
aacaaccttcaacaacattcttgcaaagatagaaggtaataatgctggggctgatgat
N N L L N N I L A K I E G N N A G A D D
gcaatcatgctcgataaagatggctatgtgtcagaaactaatgctacaaatatattcttg
A I M L D K D G Y V S E T N A T N I F L
gtgaagaaggcgtgtggtgacacctcatgctgattattgccttctctggcataactaga
V K K G R V V T P H A D Y C L P G I T R
gcaacagtcagtgagcttgctgaaggaaagttagcttttagaggagcgaagaattagc
A T V M E L V L K E S L A L E E R R I S
ttatcagaatttcacactgctgatgaggtgtggacaacaggaactatgggggagctgagc
L S E F H T A D E V W T T G T M G E L S
ccggttgcaaaatgatggacgtatagttgggtgatggctcagtagtagacataactctg
P V V K I D G R I V G D G R V G P I T L
agattgcaaaatgcttacaagaatctctcaaaagattcaggagtgccataccaacttat
R L Q N A Y K N L S K D S G V P I P T Y
gagaagagc**taaa**tacgtagtttccaggtgtatcaaaacaacagagctggagaaggggtg
E K S -
ttcttctatctagacaaaaaaaaaaaaaaaaaaaa

Рис. 1. Нуклеотидна послідовність κДНК *BCAT7* та виведена амінокислотна послідовність культурного томата *S. lycopersicum*

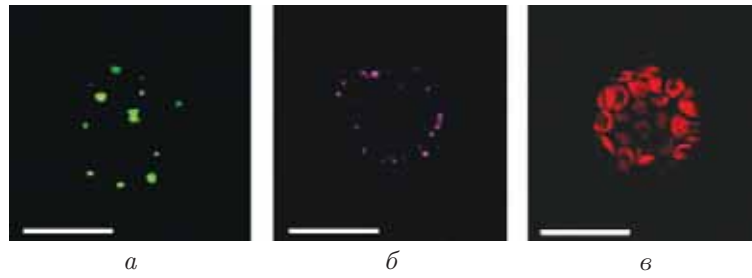


Рис. 2. Експресія химерного протеїну *BCAT7*-GFP у мезофільних протопластах тютюну. Флуоресцентні маркери: *a* — зелений флуоресцентний протеїн GFP; *б* — барвник MitoTracker; *в* — автофлуоресценція хлорофілу, GFPi MitoTracker. Масштаб — 19 мкм

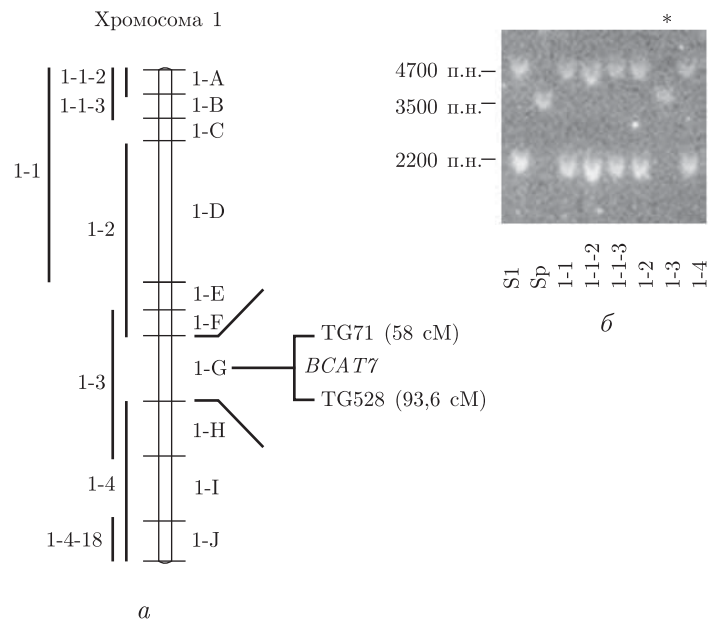


Рис. 3. Встановлення локалізації гена *BCAT7* на хромосомній карті культурного томата. *a* — локалізація на хромосомній карті; *б* — результати блотингу за Саузерном; IL1-1 – IL1-4 інтрогресивні лінії томата; Sl — *S. lycopersicum*; Sp — *S. pennellii*. Зірочкою відмічено лінію, що успадкувала даний ген від дикого виду *S. pennellii*

Виявлення факту екстрамітохондріальної локалізації нової ізоформи *BCAT*, ключового ферменту, задіяного в процесі деградації ВСАА, свідчить на користь існування додаткового шляху катаболізму амінокислот з розгалуженим ланцюгом або деяких його етапів у пероксисомах, як було запропоновано раніше [7, 9, 14].

Для подальшого з'ясування функціональної ролі гена *BCAT7* у різних типах тканин томата було проведено аналіз профілю його експресії. Рівень експресії в листках, суцвіттях, зелених (10 д. п. а.) та червоних (40 д. п. а.) плодах томата вивчали за допомогою методу qRT-PCR. Специфічні пари праймерів для генів *BCAT7* та убіквітину (*UBI3*), який використовували як внутрішній ампліфікаційний стандарт, були синтезовані за допомогою програми Primer Express (див. табл. 1). Виділення сумарної РНК, синтез одноланцюгової кДНК та RT-PCR аналіз проводили відповідно до раніше опублікованого протоколу [15]. Згідно з отриманими результатами, всі проаналізовані типи тканин мали відносно високий рівень експресії гена *BCAT7*. Однак кількість транскрипту *BCAT7* у незрілих плодах була нижчою, ніж у суцвіттях, листках і червоних стиглих плодах томата (табл. 2).

Ген *BCAT7* було картовано шляхом аналізу поліморфізму довжини рестрикційних фрагментів у популяції інтрогресивних ліній томата, отриманих від схрещування культурного томата *S. lycopersicum* (сорту М82) з його диким родичем *S. pennellii* (LA 716), як детально описано раніше [9]. Сумарну ДНК гідролізували ендонуклеазою *DraI* і гібридизували з фрагментом кДНК *BCAT7*, що був виділений із клону cLEM-6-A9 як продукт рестрикції ферментами *EcoRI* і *XhoI*. ДНК треки, що відповідали *S. lycopersicum* сорту М82 або інтрогресивним лініям, які містили *BCAT7* алель культурного томата, характеризувалися наявністю двох гібридизаційних смуг величиною 4,7 і 2,2 т. п. н., тоді як для ліній, що мали *S. pennellii* алель, була характерна наявність однієї гібридизаційної смуги розміром 3,5 т. п. н. За результатами Саузерн-блот-гібридизації встановлено, що ген *BCAT7* знаходиться на хромосомі 1 між маркерами TG71 і TG528 (рис. 3).

Порівняння даних локалізації гена *BCAT7* і кількісних метаболічних локусів (QTLs), що контролюють вміст ВСАА [9], свідчить про те, що *BCAT7* за нормальних умов не впливає істотно на кількість амінокислот з розгалуженим ланцюгом у зрілих плодах томата. Це може бути обумовлено, наприклад, існуванням додаткового механізму на білковому рівні, який контролює ензиматичну активність протеїну *BCAT7*. Крім того, це, можливо, пов'язано з надлишком вуглеводів, який існує у тканинах плодів томата і може запобігати використанню ВСАА як альтернативного джерела дихальних субстратів.

Таким чином, отримані результати свідчать про наявність у геномі томата гена *BCAT7*, що кодує нову ізоформу амінотрансфераз, задіяних у метаболізмі амінокислот з розгалуженим ланцюгом томата. Наведені дані щодо структури, хромосомної локалізації та специфічності експресії гена *BCAT7*. Виявлення позахлоропластної та позамітохондріальної субклітинної локалізації цього ферменту вказує на складну організацію процесу деградації ВСАА, який потребує узгодженої взаємодії трьох різних клітинних компартментів.

Таблиця 2. Органоспецифічна експресія гена *BCAT7*

Тип тканини томата	Рівень експресії <i>BCAT7</i> , qRT-PCR (40- Δ Ct)
Суцвіття	36,85 \pm 0,08
Листя	35,48 \pm 0,14
Зелені плоди	34,04 \pm 0,07
Червоні плоди	35,46 \pm 0,09

1. *Yoshizawa F.* Regulation of protein synthesis by branched-chain amino acids in vivo // *Biochem. Biophys. Research Com.* – 2004. – **313**. – P. 417–422.
2. *Binder S.* Branched-Chain Amino Acid Metabolism in *Arabidopsis thaliana* // *The Arabidopsis Book.* – 2010. – **8**. – doi:10.1199/tab.0137.
3. *Singh B. K., Shaner D. L.* Biosynthesis of branched chain amino acids: from test tube to field // *Plant Cell.* – 1995. – **7**. – P. 935–944.
4. *Hagelstein P., Sieve B., Klein M. et al.* Leucine synthesis in chloroplasts: Leucine/isoleucine aminotransferase and valine aminotransferase are different enzymes in spinach chloroplasts // *J. Plant Physiol.* – 1997. – **150**. – P. 23–30.
5. *Anderson M. D., Che P., Song J. et al.* 3-Methylcrotonyl-coenzyme A carboxylase is a component of the mitochondrial leucine catabolic pathway in plants // *Plant Physiol.* – 1998. – **118**. – P. 1127–1138.
6. *Schuster J., Binder S.* The mitochondrial branched-chain aminotransferase (AtBCAT-1) is capable to initiate degradation of leucine, isoleucine and valine in almost all tissues in *Arabidopsis thaliana* // *Plant. Mol. Biol.* – 2005. – **57**. – P. 241–254.
7. *Gerbling H., Gerhardt B.* Peroxisomal Degradation of branched-chain 2-oxo acids // *Plant. Physiol.* – 1989. – **91**. – P. 1387–1392.
8. *Reumann S., Ma C., Lemke S., Babujee L.* AraPeroX. A Database of Putative *Arabidopsis* Proteins from Plant Peroxisomes // *Ibid.* – 2004. – **136**. – P. 2587–2608.
9. *Lange P. R., Eastmond P. J., Madagan K., Graham I. A.* An *Arabidopsis* mutant disrupted in valine catabolism is also compromised in peroxisomal fatty acid beta-oxidation // *FEBS Lett.* – 2004. – **571**. – P. 147–153.
10. *Кочевенко А. С., Ферні А. Р.* Картування генів томата, задіяних у метаболізмі амінокислот з розгалуженим ланцюгом // *Доп. НАН України.* – 2011. – № 7. – С. 156–160.
11. *Mueller L. A., Solow T. H., Taylor N. et al.* The SOL Genomics Network: a comparative resource for Solanaceae biology and beyond // *Plant Physiol.* – 2005. – **138**. – P. 1310–1317.
12. *Karimi M., Inze D., Depicker A.* GATEWAY^(TM) vectors for *Agrobacterium*-mediated plant transformation // *Trends Plant Sci.* – 2002. – **7**. – P. 193–195.
13. *Paszowski J., Shillito R. D., Saul M. et al.* Direct gene transfer to plants // *EMBO J.* – 1984. – **3**. – P. 2717–2722.
14. *Gerbling H., Gerhardt B.* Oxidative decarboxylation of branched-chain 2-oxo fatty acids by higher plant peroxisomes // *Plant Physiol.* – 1988. – **88**. – P. 13–15.
15. *Кочевенко А. С., Ферні А. Р.* Характеристика гена *IPMD-SSU1 Lycopersicon esculentum* та його роль у біосинтезі лейцину // *Доп. НАН України.* – 2011. – № 9. – С. 153–158.

Інститут клітинної біології та генетичної інженерії НАН України, Київ
Макс-Планк-Інститут молекулярної фізіології рослин, Гольм, Німеччина

Надійшло до редакції 20.01.2012

А. С. Кочевенко, А. Р. Ферні

Клонирование и картирование гена, кодирующего новую немитохондриальную изоформу аминотрансферазы культурного томата, задействованную в деградации аминокислот с разветвленной цепью

Идентифицирован новый ген томата (BCAT7), кодирующий новую изоформу аминотрансфераз, задействованных в метаболизме аминокислот с разветвленной цепью. Ген был картирован в геномном регионе между маркерами TG71 и TG528 на хромосоме 1. Полноразмерная кодирующая нуклеотидная последовательность данного гена установлена с помощью RACE-PCR. Изучена экспрессия гена в разных типах тканей томата и определена субклеточная локализация кодируемого им протеина.

A. S. Kochevenko, A. R. Fernie

Cloning and mapping of the gene encoding a new extramitochondrial aminotransferase isoform of cultivated tomato which is involved in the degradation of branched chain amino acids

New tomato gene BCAT7 encoding a new branched chain amino acid aminotransferase isoform is identified. The gene is mapped on chromosome 1 between markers TG71 and TG528. Full-length CDS of the gene was determined by RACE-PCR. Gene expression and subcellular localization of the encoded protein are characterized.



УДК 577.152.311/547.8/548.73

© 2012

Академик НАН України С. А. Андронати, Е. А. Шестеренко,
А. Г. Артеменко, П. Г. Полищук, Е. Н. Муратов,
О. В. Севастьянов, И. И. Романовская, В. Е. Кузьмин

Исследование влияния ионов металлов на активность карбоксилэстеразы печени свиньи методом QSAR

Исследовано влияние 17 ионов металлов различных групп на эстеразную активность карбоксилэстеразы, выделенной из печени свиньи. Показано активирующее влияние ионов Na^+ на активность фермента. С использованием в качестве дескрипторов атомных и ионных радиусов, а также ионизационной электроотрицательности впервые была получена QSAR модель, описывающая влияние широкого набора ионов металлов на активность карбоксилэстеразы.

Карбоксилэстераза (КФ 3.1.1.1) печени свиньи, обладающая широкой субстратной специфичностью и высокой стереоселективностью [1], является перспективной для исследования метаболизма, активации лекарственных веществ и пролекарств *in vitro* [2], а также для стереоселективного гидролиза и синтеза широкого ряда алициклических, карбо- и гетероциклических соединений [3]. В литературе имеются сведения о влиянии ионов металлов на эстеразную активность карбоксилэстераз различного происхождения. Это влияние осуществляется за счет неспецифического связывания ионов металлов молекулами фермента. В результате некоторые ионы металлов, например K^+ , Na^+ , Ca^{2+} , Mn^{2+} , являются активаторами карбоксилэстеразы, тогда как другие — Ni^{2+} , Cu^{2+} , Co^{2+} , Cd^{2+} , Hg^{2+} могут ингибировать активность фермента [4, 5]. С помощью анализа QSAR (Quantitative Structure-Activity Relationship) исследовано влияние ограниченного числа ионов металлов на эстеразную активность *Tetrahymena pyriformis*. Для построения модели использовали коэффициент мягкости ионов металлов ($R^2 = 0,82$) [6].

Поскольку действие ионов металлов на эстеразную активность карбоксилэстеразы печени свиньи изучено недостаточно, актуально использование метода QSAR для исследования влияния расширенного ряда ионов металлов с широким набором характеристик на активность фермента.

Материалы и методы исследования. Карбоксилэстеразу из микросомальной фракции (МФ) выделяли согласно с разработанным методом, описанным в публикации [7]. В вы-

деленном препарате карбоксилэстеразы были определены: содержание белка методом Лоури в модификации Хартри [8], эстеразная активность — с помощью 1-нафтилацетата [9]; влияние ионов металлов — по изменению эстеразной активности карбоксилэстеразы в их присутствии (конечная концентрация хлоридов металлов составляла 1 ммоль/дм³). Для получения количественной оценки влияния ионов металлов на эстеразную активность применялся метод множественной линейной регрессии [10]. В качестве дескрипторов, описывающих свойства ионов металлов, использовали 70 характеристик [11], в том числе размеры, поляризуемость, термодинамические характеристики.

Результаты и их обсуждение. Нами разработан новый эффективный и доступный метод выделения препарата карбоксилэстеразы (заключающийся в получении МФ из печени свиньи методом низкоскоростной седиментации с использованием Ca²⁺), последующей экстракцией фермента раствором пиродифосфата натрия и фракционированием фермента сульфатом аммония, что позволило выделить ферментный препарат с выходом белка 2,24 мг/г ткани и эстеразной активностью 149,0 мкмоль/(мг белка · мин) [7].

Полное ингибирование указанного препарата селективным ингибитором карбоксилэстераз ди-(*n*-нитрофенил)фосфатом (180 мкмоль/дм³) подтверждает его принадлежность к семейству карбоксилэстераз, а также свидетельствует об отсутствии примесей других эстераз. О принадлежности данного фермента к семейству карбоксилэстераз свидетельствуют и результаты SDS- и нативного электрофореза [7]. Исследование влияния 17 ионов металлов на эстеразную активность полученной карбоксилэстеразы показало, что добавление в реакционную среду хлорида Na привело к активации фермента на 16%. Остальные хлориды являлись в большей или меньшей степени ингибиторами фермента (табл. 1).

С использованием метода пошаговой линейной регрессии нами получена количественная оценка влияния ионов металлов на эстеразную активность. Для этого вся выборка была разделена на два набора: обучающий — 14 ионов и тестовый — 3 иона (см. табл. 1). К тесто-

Таблица 1. Наблюдаемые и предсказанные значения активности карбоксилэстеразы и исходные значения дескрипторов металлов, используемых в полученной регрессионной модели

Ион металла	Активность фермента, %		Дескриптор, %			
	$A_{\text{набл}}$	$A_{\text{пред}}$	EN^I	r^A	r^{I6}	$D = r^A - r^{I6}$
Li ⁺	105,4	100,9	0,90	1,55	0,76	0,79
Na ⁺	115,7	94,7	0,88	1,89	1,02	0,87
K ⁺	85,5	91,3	0,81	2,36	1,38	0,98
Cu ^{+*}	12,1	28,0	1,14	1,97	0,77	1,20
Mg ²⁺	35,0	41,9	1,31	1,60	0,72	0,88
Zn ²⁺	52,0	24,4	1,66	1,39	0,74	0,65
Sr ²⁺	20,4	53,9	1,13	2,15	1,18	0,97
Cd ²⁺	22,5	28,7	1,66	1,56	0,95	0,61
Ba ²⁺	77,7	72,9	1,07	2,21	1,35	0,86
Al ³⁺	78,1	87,9	1,64	1,43	1,35	0,08
La ³⁺	50,4	41,4	1,35	1,87	1,03	0,84
Sn ²⁺	32,2	28,8	1,41	1,58	0,69	0,89
Mn ^{2+*}	92,4	77,4	1,38	1,30	0,83	0,47
Fe ²⁺	37,8	55,7	1,40	1,26	0,61	0,65
Co ²⁺	69,6	55,3	1,43	1,25	0,63	0,62
Ni ^{2+*}	57,1	60,4	1,45	1,24	0,69	0,55
Cr ³⁺	10,4	14,8	1,74	1,27	0,62	0,65

*Металлы тестовой выборки.

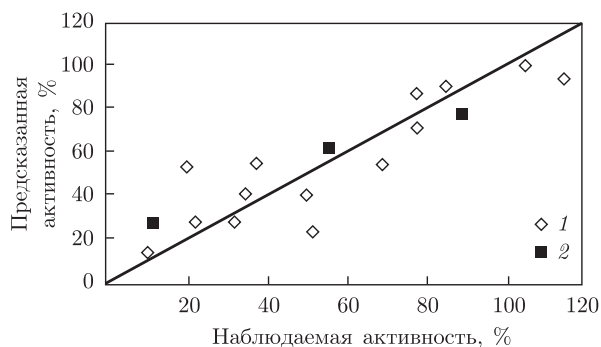


Рис. 1. Соотношение наблюдаемых и предсказанных значений изменения активности фермента для обучающей (1) и тестовой (2) выборок

вому набору случайным образом были отнесены ионы металлов Cu^+ , Mn^{2+} , Ni^{2+} . В таблице приведены значения активности фермента в присутствии ионов металлов, а также значения дескрипторов, используемых для построения модели.

В результате регрессионного анализа была получена адекватная двухпараметрическая QSAR модель, описывающая изменение активности (A , %) фермента в присутствии ионов металлов:

$$A = 293 - 120EN^I - 107D, \quad (1)$$

где EN^I — ионизационная электроотрицательность; $D = r^A - r^{I6}$ — разность между атомным радиусом Me (r^A) и ионным радиусом для координационного числа, равного 6 (r^{I6}). Статистические характеристики модели следующие: коэффициент корреляции $R^2 = 0,77$; среднеквадратичная ошибка предсказания $SE = 17,1$; критерий Фишера $F = 18,2$, что значительно превышает критическое значение ($F_{кр} = 3,0$). Модель является устойчивой (коэффициент корреляции в условиях скользящего контроля $Q^2 = 0,59$) и обладает хорошей предсказывающей способностью ($R_{test}^2 = 0,85$). Диаграмму соотношения наблюдаемых и предсказанных значений изменения активности фермента для обучающей и тестовой выборок демонстрирует рис. 1.

Параметры, используемые в модели, с одной стороны, характеризуют поляризующее влияние ионов (EN^I), с другой — способность тех же ионов к поляризации (параметр $D = r^A - r^{I6}$ фактически отражает размер электронной оболочки), т. е., чем меньше величины EN^I и D , тем выше активность фермента в присутствии иона металла. Рассматриваемые свойства, в сущности, отражают обратные тенденции в распределении электронной плотности: коэффициент взаимных корреляций для них равен $R(EN^I, D) = -0,65$ (рис. 2). Сильно поляризующие ионы (Al^{3+}) имеют высокое значение EN^I , но низкое значение D , а наиболее поляризующиеся ионы (Cu^+) — напротив, низкое значение EN^I и высокое значение D (см. табл. 1). В связи с этим, максимальная активность фермента сохраняется в присутствии ионов щелочных металлов, обладающих низкой ионизационной электроотрицательностью (EN^I) и средними значениями D .

Рис. 3 иллюстрирует соотношение абсолютных величин нормированных (приведенных к единой шкале) вкладов значений дескрипторов (EN^I , D , %) в изучаемое свойство, рассчитанных по уравнению (1). Как видно из диаграммы, ионизационная электроотрицательность в большей степени влияет на изменение активности фермента.

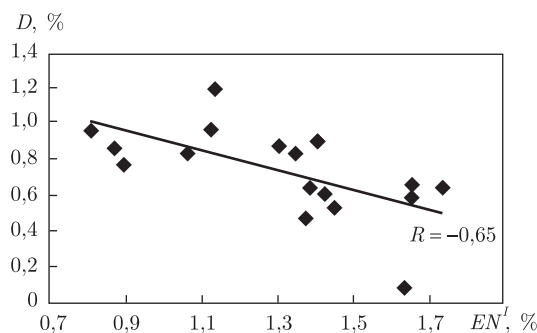


Рис. 2. Соотношение между ионизационной электроотрицательностью ионов металлов (EN^I) и параметром D , характеризующим размер электронной оболочки

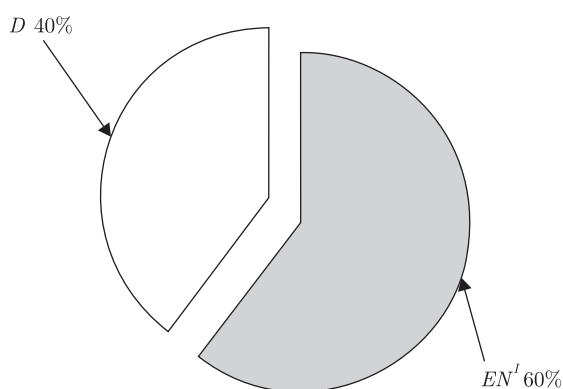


Рис. 3. Процентное соотношение вкладов дескрипторов в изменение активности карбоксилэстеразы

Полученные результаты относительно влияния переходных металлов на активность карбоксилэстеразы полностью согласуются с рядом Ирвинга–Вильямса ($Mn^{2+} < Co^{2+} < Ni^{2+} < Cu^{2+} > Zn^{2+}$) в соответствии с прочностью комплекса иона металла с молекулой белка (Н. Irving, R. J. P. Williams, 1953). Построенная QSAR модель позволяет установить количественный вклад структурных характеристик расширенного набора ионов металлов в изменение активности карбоксилэстеразы с возможностью ее прогноза.

Таким образом, установлено активирующее влияние ионов Na^+ на активность карбоксилэстеразы микросомальной фракции печени свиньи. Нами впервые была получена QSAR модель, описывающая влияние ионов металлов различных групп на активность карбоксилэстеразы печени свиньи.

1. Redinbo M. R., Bencharit S., Potter P. M. Human carboxylesterase 1: from drug metabolism to drug discovery // *Biochem. Soc. Trans.* – 2003. – **31**, No 1. – P. 620–624.
2. Hosokawa M. Structure and catalytic properties of carboxylesterase isozymes involved in metabolic activation of prodrug // *Molecules.* – 2008. – **13**, No 2. – P. 412–431.
3. Bornscheuer U. T., Kazlauskas R. J. *Hydrolases in organic synthesis.* – Weinheim: Wiley-VCH, 2006. – 368 p.
4. Faiz O., Colak A., Saglam N. et al. Determination and characterization of thermostable esterolytic activity from a novel thermophilic bacterium *Anoxybacillus gonensis* A4 // *J. Biochem. Mol. Biol.* – 2007. – **40**, No 4. – P. 588–594.

5. Yu S., Zheng B., Zhao X., Feng Y. Gene cloning and characterization of a novel thermophilic esterase from *Fervidobacterium nodosum* Rt17-B1 // *Acta biochim. et biophys. Sin.* – 2010. – **42**, No 4. – P. 288–295.
6. Bogaerts P., Bohatierb J., Bonnemoya F. Use of the ciliated protozoan *Tetrahymena pyriformis* for the assessment of toxicity and quantitative structure–activity relationships of xenobiotics: Comparison with the Microtox Test // *Ecotoxicol. Environ. Saf.* – 2001. – **49**, No 3. – P. 293–301.
7. Андронаті С. А., Шестеренко Є. А., Севастьянов О. В. та ін. Виділення і характеристика карбоксилестерази печінки свині та її використання в отриманні стереоселективних похідних 1,4-бенздіазепін-2-ону // *Біотехнологія*. – 2011. – **4**, № 5. – С. 71–76.
8. Hartree E. F. Determination of protein: a modification of the Lowry method, that gives a linear photometric response // *Anal. Biochem.* – 1972. – **48**, No 2. – P. 422–427.
9. Yang S., Liu K., Guengerich P. Enantioselective hydrolysis of oxazepam 3-acetate by esterases in human and rat liver microsomes and rat brain S9 fraction // *Chirality*. – 1990. – **2**, No 3. – P. 150–155.
10. Фёрстер Э., Рёниц Б. Методы корреляционного и регрессионного анализа. – Москва: Финансы и статистика, 1983. – 304 с.
11. Волков А. И., Жарский И. М. Большой химический справочник. – Минск: Совр. шк., 2005. – 608 с.

Фізико-хімічний інститут ім. А. В. Богатського
НАН України, Одеса

Поступило в редакцію 06.04.2012

Академік НАН України С. А. Андронаті, Є. А. Шестеренко, А. Г. Артеменко,
П. Г. Поліщук, Є. Н. Муратов, О. В. Севастьянов, І. І. Романовська,
В. Є. Кузьмін

Дослідження впливу іонів металів на активність карбоксилестерази печінки свині методом QSAR

Досліджено вплив 17 іонів металів різних груп на естеразну активність карбоксилестерази, виділеної з печінки свині. Показано активуючий вплив іонів Na^+ на активність ферменту. З використанням як дескрипторів атомних та іонних радіусів, а також іонізаційної електронегативності вперше було отримано QSAR модель, що описує вплив широкого набору іонів металів на активність карбоксилестерази.

Academician of the NAS of Ukraine S. A. Andronati, E. A. Shesterenko,
A. G. Artemenko, P. G. Polyschuk, E. N. Muratov, O. S. Sevastyanov,
I. I. Romanovska, V. E. Kuz'min

Investigation of metal ions influence on the activity of pig liver carboxyl esterase by the QSAR method

The influence of 17 metal ions belonging to different groups on the activity of carboxyl esterase isolated from porcine liver is studied. The activating action of Na^+ ions on the enzyme activity is shown. Using atomic and ionic radii, as well as the ionization electronegativity as descriptors, the QSAR model describing the influence of the wide collection of metal ions on the carboxyl esterase activity is first developed.

И. В. Семенюта, В. В. Ковалишин, В. В. Прокопенко

Создание QSAR моделей для поиска ингибиторов трипсина

(Представлено академиком НАН Украины В. П. Кухарем)

В исследовании представлены новые QSAR модели для поиска ингибиторов трипсина. Для построения моделей использовали ассоциативные нейронные сети. Оценку качества моделей проводили методами внутренней и внешней проверки. На основании анализа трех выборок веществ (с известными значениями IC_{50} и K_i) был получен ряд регрессионных моделей с точностью прогноза $q^2 > 0,7$ и классификационные модели с прогнозирующей способностью 69–80%.

Ключевое положение трипсина в системе пищеварительных ферментов объясняется тем, что он не только участвует в расщеплении пищевых белков, но и активирует все проферменты, образующиеся в поджелудочной железе [1]. При этом активность трипсина угнетается большим числом природных ингибиторов, которые предохраняют ткани от разрушения трипсином. Дефицит (или дефект) некоторых ингибиторов трипсина служит причиной развития патологических состояний [2]. Ингибиторы трипсина применяются также при остром панкреатите и остром некрозе поджелудочной железы, хроническом панкреатите, для профилактики послеоперационного некроза поджелудочной железы, сепсисе, заболеваниях кроветворных органов, карциномах, а также при остром неспецифическом послеоперационном раннем паротите [3, 4]. Принимая во внимание изученность трипсина и механизмов его регуляции, актуальным является создание новых ингибиторов фермента с повышенной специфичностью и улучшенной эффективностью.

В настоящее время создание нового лекарственного препарата неразрывно связано с использованием вычислительной техники, в частности различных математических методов анализа данных, реализованных в форме программного обеспечения. Данный подход позволяет создавать прогнозирующие компьютерные QSAR¹ модели, которые устанавливают связь между химической структурой и биологической активностью исследуемых соединений [5]. QSAR является важным инструментом для автоматизированного предварительного виртуального скрининга баз данных, разработки и комбинаторных библиотек молекулярных фрагментов, дает возможность проводить идентификацию и количественное выражение структурных параметров или физико-химических свойств физиологически активных веществ в виде дескрипторов с целью выявления факта влияния каждого из них на биологическую активность [6]. Поэтому применение методов QSAR при создании новых соединений с заданными свойствами позволяет значительно сократить время и ресурсы, а также осуществлять более целенаправленный синтез соединений, обладающих необходимым заданным комплексом свойств.

Материалы и методы исследования. *Выборка данных.* В ходе исследования мы проанализировали три выборки соединений с известными значениями IC_{50} и K_i , которые отобраны на основе литературных данных и систематизированных в PubChem [7] и ChEMBL [8]

¹Quantitative Structure-Activity Relationship.

базах данных соединений. Для всех наборов данных использовали стандартную процедуру. Каждая из молекул была смоделирована с помощью программы Chemaxon standardizer [9]. 2D координаты атомов были пересчитаны заново, ионы и соли удалены из молекулярной структуры, молекулы приведены к нейтральной форме, дубликаты удалены. 3D структуры смоделированы с помощью программы Chemaxon standardizer [9] и сохранены в SDF-формате.

Расчет дескрипторов. Для расчета молекулярных дескрипторов использовали пакет DRAGON [10], обеспечивающий расчет более чем 3200 молекулярных дескрипторов. Каждый дескриптор имеет уникальный код, позволяющий его дальнейшую идентификацию. В результате для каждого соединения были рассчитаны QSAR дескрипторы, такие, как гидрофобность, молекулярный объем, количество атомов, количество доноров и акцепторов электронов, количество подвижных связей и другие. Затем первоначальное количество рассчитанных дескрипторов было сокращено. Сначала удаляли дескрипторы, которые имели постоянные значения для всех молекул, затем взаимно коррелированные дескрипторы, т. е. если коэффициент корреляции дескриптора с другими дескрипторами был равен или превышал 0,95, то он удалялся из исходной выборки.

Математический аппарат QSAR — методы многомерного статистического анализа данных: линейный и нелинейный регрессионный анализ, дисперсионный анализ, различные методы классификации и распознавания образов, такие, как ИНС (искусственные нейронные сети), ЧНК (частные наименьшие квадраты), генетические алгоритмы, метод k -БС (k -ближайших соседей) и другие [6]. В нашей работе для построения прогнозирующих моделей использовался метод ИНС [5]. Для выбора наиболее информативных дескрипторов применяли специальные методы анализа информативности дескрипторов, известные как “pruning methods” [11]. Удаление наименее информативных дескрипторов повышает надежность результатов и увеличивает скорость обучения ИНС [11].

Статистические коэффициенты. Прогнозирующая способность регрессионных моделей оценивалась с помощью коэффициента перекрестной оценки q^2 , предложенного Крамером с соавторами [12]:

$$q^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^N (Y_i - Y_{\text{mean}})^2}, \quad (1)$$

где O_i — расчетный вектор активности молекулы i ; Y_i — целевой вектор активности молекулы i ; Y_{mean} — среднее значение Y_i ; N — количество соединений. Кроме этого, для каждой модели рассчитывалась среднеквадратическая ошибка прогноза (root mean squared error, RMSE).

Другие параметры, такие, как чувствительность (Sn), специфичность (Sp) и общая точность модели (Ac), использовались для оценки качества классификационных моделей [13]:

$$Sn = \frac{TP}{TP + FN}, \quad (2)$$

$$Sp = \frac{TN}{TN + FP}, \quad (3)$$

$$Ac = \frac{TP + TN}{TP + FN + TN + FP}. \quad (4)$$

Здесь TP — количество активных соединений, предсказанных правильно, т. е. как активные; FP — количество активных соединений, предсказанных неправильно, т. е. как неактивные; TN — количество неактивных соединений, предсказанных правильно, т. е. как неактивные; FN — количество неактивных соединений, предсказанных неправильно, т. е. как активные.

Методика внешней оценки качества QSAR моделей состоит в использовании тестовых наборов соединений, которые не берут участия в построении модели. В нашей работе выполнялось внешнее тестирование с использованием альтернативного подхода [14], состоящего в применении 20% соединений, случайным образом отобранных в тестовый набор, тогда как оставшиеся 80% соединений из общего набора данных использовались для построения QSAR моделей. Эту процедуру последовательно повторили пять раз и при этом получили пять тестовых наборов данных, пять наборов для обучения. Таким образом, для каждого набора данных было создано пять моделей и обобщенный прогноз на основе тестовых наборов данных.

Результаты и их обсуждение. Для лучшего понимания факторов, лежащих в основе ингибиторной активности трипсина, были исследованы три различных набора данных. Первый — состоял из 1240 соединений из ChEMBL базы данных. Степень активности соединений оценивалась величиной константы ингибирования (K_i). Для каждого соединения с помощью пакета DRAGON получили 1753 дескриптора. Применение методов отбора дескрипторов позволило сократить их количество до 53–66, при этом значительно улучшив точность и качество полученных моделей. Результаты данного анализа приведены в табл. 1. Точность прогноза, полученная методом ИНС для учебных выборок, была приблизительно равна и составила $q^2 = 0,81–0,83$, тогда как для тестовых наборов значения незначительно варьировались от 0,71 до 0,79. Коэффициент перекрестной оценки q^2 для всей выборки равнялся 0,76, что свидетельствует о хорошей прогнозирующей способности предложенных моделей (см. табл. 1).

Соотношения экспериментальных значений $-\log(K_i)$ к их предсказанным значениям для всего набора данных демонстрирует рис. 1. Большинство предсказанных значений не отличается от экспериментальных более чем на один порядок, что также подтверждает приведенные выше выводы.

Второй набор данных состоял из 620 соединений, полученных с PubChem базы данных. Степень активности соединений оценивалась величиной IC_{50} . Наилучшая модель была построена на основе 106–280 дескрипторов (см. табл. 1). Точность прогноза составила $q^2 = 0,74–0,77$ для учебных выборок и $q^2 = 0,61–0,66$ для тестовых наборов. Качество мо-

Таблица 1. Статистический анализ результатов для наборов данных №1 и №2

№ п/п	Название	Число дескрипторов	Набор данных № 1 (K_i)	Число дескрипторов	Набор данных № 2 (IC_{50})
			Набор обучения (тестовый набор), q^2		Набор обучения (тестовый набор), q^2
1	Набор данных № 1	65	0,81 (0,79)	106	0,75 (0,61)
2	Набор данных № 2	60	0,83 (0,77)	280	0,76 (0,61)
3	Набор данных № 3	66	0,83 (0,71)	138	0,77 (0,63)
4	Набор данных № 4	56	0,82 (0,77)	270	0,74 (0,66)
5	Набор данных № 5	53	0,81 (0,78)	216	0,77 (0,66)
6	Общий набор	—	0,76	—	0,63

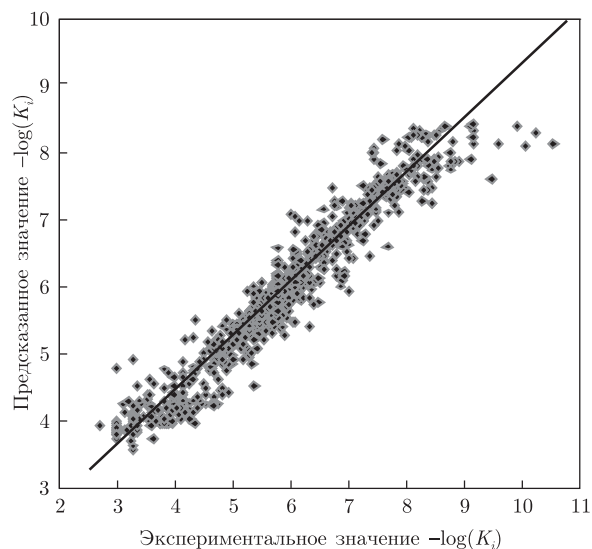


Рис. 1

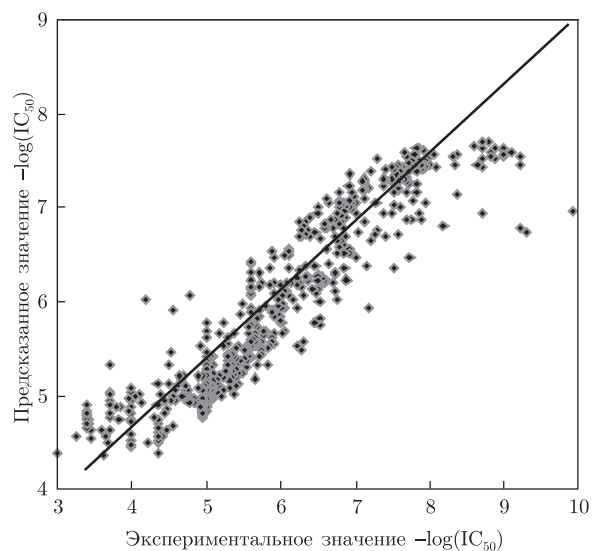


Рис. 2

дели для всей выборки — $q^2 = 0,63$, что обусловлено разнообразием данных, представленных в данном наборе (см. табл. 1; рис. 2). Соотношения экспериментальных значений $-\log(\text{IC}_{50})$ к их предсказанным значениям для всего набора данных демонстрирует рис. 2. Большинство предсказанных значений отличается от экспериментальных в пределах одного значения $\log(\text{IC}_{50})$. Следует отметить, что активность некоторых соединений предсказана как более низкая, т. е. отличается от экспериментальных значений активности более чем $2 \log(\text{IC}_{50})$, что несколько ухудшает значение q^2 для обобщенной модели (см. № 6 в табл. 1; рис. 2).

В качестве дополнительного критерия для поиска потенциальных ингибиторов трипсина был построен также ряд классификационных моделей. Для построения моделей использовалась выборка из 446 соединений, отобранных из PubChem базы данных [7]. Среди этих

Таблица 2. Статистический анализ результатов для набора данных №3

№ п/п	Название	Набор обучения				Тестовый набор			
		Количество молекул	S_n	S_p	A_c	Количество молекул	S_n	S_p	A_c
1	Набор данных № 1	356	0,88	0,90	0,89	90	0,71	0,70	0,70
2	Набор данных № 2	357	0,90	0,88	0,89	89	0,69	0,67	0,68
3	Набор данных № 3	357	0,88	0,89	0,88	89	0,77	0,77	0,76
4	Набор данных № 4	357	0,87	0,85	0,86	89	0,70	0,80	0,75
5	Набор данных № 5	357	0,89	0,90	0,90	89	0,65	0,72	0,69
6	Общий набор	—	—	—	—	446	0,74	0,73	0,74

соединений 50% являются ингибиторами трипсина, а другие 50% — активаторами трипсина, что является необходимым условием создания полноценных моделей. Соединения аналогично разделили на пять выборок и построили пять QSAR моделей. Точность прогноза для учебных выборок составила 85–90% и 69–80% для тестовых выборок (табл. 2).

В этом исследовании был представлен ряд новых QSAR моделей с точностью прогноза $q^2 > 0,7$ для поиска новых ингибиторов трипсина. Для построения этих моделей были использованы известные ингибиторы трипсина различных химических классов, что позволит получать достоверные результаты прогноза для химических веществ различных классов. Высокая прогнозирующая способность полученных классификационных моделей (69–80%) дает возможность с высокой степенью достоверности на начальном этапе исследований определять у веществ активирующую либо ингибирующую направленность действия на фермент. Следует добавить, что представленные методы позволяют быстро строить прогнозирующие QSAR модели не только для поиска новых ингибиторов трипсина, но и для других видов биологической активности среди различных классов химических соединений.

1. Антонов В. К. Химия протеолиза. – Москва: Наука, 1991. – 504 с.
2. Веремеенко К. Н., Голобородько О. П., Кизим А. И. Протеолиз в норме и при патологии. – Киев: Здоровье, 1988. – 199 с.
3. Веремеенко К. Н. Протеолитические ферменты и их ингибиторы. Новые области применения в клинике // Врач. дело. – 1994. – № 1. – С. 8–13.
4. Stenman U. Role of the tumor-associated trypsin inhibitor SPINK1 in cancer development // Asian J. Androl. – 2011. – **13**. – P. 628–629.
5. Gasteiger J., Zupan J. Neural networks in chemistry // Chem. Int. Ed. Engl. – 1993. – **32**. – P. 503–527.
6. Tetko I., Sushko I., Pandey A. et al. Critical Assessment of QSAR Models of Environmental Toxicity against *Tetrahymena pyriformis*: Focusing on Applicability Domain and Overfitting by Variable Selection // J. Chem. Inform. Model. – 2008. – **48** (9). – P. 1733–1746.
7. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov>.
8. <https://www.ebi.ac.uk/chembl/>.
9. <http://www.chemaxon.com/products/>.
10. http://www.taletе.mi.it/products/dragon_description.htm.
11. Tetko I., Villa A., Livingstone D. Neural network studies. 2. Variable selection // J. Chem. Inform. Comput. Sci. – 1996. – **36**. – P. 794–803.
12. Cramer R. D., Patterson D. E., Bunce J. D. Comparative Molecular Field Analysis (CoMFA). 1. Effect of shape on binding of steroids to carrier proteins // J. Am. Chem. Soc. – 1988. – **110**. – P. 5959–5967.
13. Li Q., Lai L. Prediction of potential drug targets based on simple sequence properties // BMC Bioinformatics. – 2007. – **8**. – P. 353–363.
14. Tropsha A. Best Practices for QSAR Model Development, Validation, and Exploitation // Mol. Inf. – 2010. – **29**. – P. 476–488.

Институт биоорганической химии
и нефтехимии НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 21.03.2012

I. В. Семенюта, В. В. Ковалишин, В. В. Прокопенко

Створення QSAR моделей для пошуку інгібіторів трипсину

У дослідженні представлено нові QSAR моделі для пошуку інгібіторів трипсину. Для побудови моделей використовували асоціативні нейронні сітки. Оцінку якості моделей здійснювали методами внутрішньої і зовнішньої перевірки. На підставі аналізу трьох вибірок речовин (з відомими значеннями IC_{50} й K_i), був отриманий ряд регресійних моделей з точністю прогнозу $q^2 > 0,7$ та класифікаційні моделі з прогнозуючою здатністю 69–80%.

I. V. Semenyuta, V. V. Kovalishin, V. V. Prokopenko

Creation of QSAR models to search for inhibitors of trypsin

New QSAR models to search for inhibitors of trypsin are presented. The models are built with the use of associative neural networks. The quality of models has been evaluated using both internal and external validation methods. Based on the analysis of three samples of substances with the known values of IC_{50} and K_i , a number of regression models with a prediction accuracy of $q^2 > 0.7$ and the classification models with a predictive ability of 69–80% are obtained.

Член-корреспондент НАН Украины Н. Я. Спивак, А. В. Кочетов,
О. Й. Лозова, Л. В. Юзвенко, Т. Ю. Сабирова, А. А. Демченко,
Л. Ф. Диденко

Восприимчивость трансгенных растений картофеля к вирусу ожога гречихи

Визуальная оценка инфицированных вирусом ожога гречихи (ВОГ) трансгенных и нетрансгенных растений картофеля показала, что трансгенные растения, экспрессирующие ген рибонуклеазы цинчи, характеризовались повышенной устойчивостью к ВОГ. В инфицированных и неинфицированных ВОГ трансгенных растениях картофеля отмечался сниженный уровень содержания суммарных РНК по сравнению с соответствующим контролем. Уровень накопления ВОГ в трансгенных растениях на 14 сут после инфицирования был ниже в 1,7 раза по сравнению с таковым в нетрансгенных растениях.

Вирусостойчивость растений определяется механизмами, включающими как неспецифические, так и патогенспецифические защитные реакции, контролируемые различными комплексами генов [1]. Нуклеазы могут представлять собой один из компонентов системы вирусостойчивости, поэтому исследование растений с различной нуклеазной активностью, отображающей их неодинаковую восприимчивость к вирусам, представляет значительный интерес. Ранее было показано, что увеличенная экспрессия рибонуклеаз у растений *Nicotiana tabacum* сопровождается повышением устойчивости к некоторым вирусам, в связи с чем было выдвинуто предположение об участии соответствующих генов в одном из механизмов защиты от фитопатогенных вирусов [2, 3].

Целью наших исследований является изучение влияния экспрессии гена гетерологичной РНКазы *Zinnia elegans* на качественные изменения восприимчивости трансгенных растений картофеля к рабдовирусу — вирусу ожога гречихи (ВОГ).

ВОГ передается механическим путем и поражает широкий круг растений из 10 семейств, среди которых важнейшие сельскохозяйственные культуры в Украине из семейств пасленовых, гречишных, бобовых и тыквенных. Интерес использования фиторабдовируса мотивирован тем, что подобные исследования относительно растительных рабдовирусов не проводились, а механизм их репродукции отличается от ранее изученного в этой области вируса табачной мозаики [2].

Трансгенные растения картофеля с модифицированным уровнем активности рибонуклеазы были получены из Института цитологии и генетики СО РАН. Трансгенные и нетрансгенные растения картофеля инокулировали очищенным вирусным препаратом в концентрации 100 мкг/мл. В качестве контроля использовали растения картофеля, инокулированные буферным раствором, не содержащим вирус.

В результате проведенных исследований установлено, что трансгенные растения картофеля, экспрессирующие ген экстраклеточной рибонуклеазы *Z. elegans*, не отличались от контрольных растений по фенотипу и срокам их развития.

Визуальная оценка инфицированных ВОГ контрольных и трансгенных растений картофеля показала, что трансгенные растения характеризовались повышенной устойчиво-

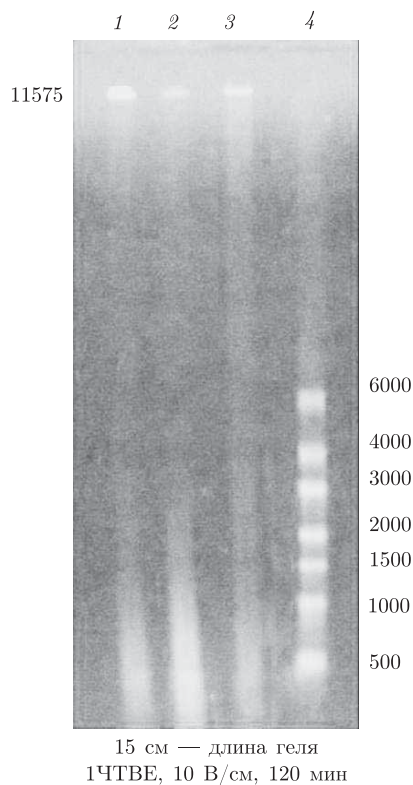


Рис. 1. Электрофореграмма РНК вируса ожога гречихи: 1 — РНК ВОГ, выделенная из растения-накопителя *Nicotiana rustica*; 2 — РНК ВОГ из трансгенного растения картофеля; 3 — РНК ВОГ из нетрансгенного растения картофеля; 4 — маркеры 6000, 4000, 3000, 2000, 1500, 1000, 500 нуклеотидов

тью к ВОГ. Симптомы заболевания на трансгенной линии картофеля проявились через 28 сут наблюдения в виде мелких некрозов, что может быть характерной особенностью устойчивости, поскольку за границы некроза вирусная инфекция не распространялась. На мок-инокулированных листьях трансгенных растений аналогичные некрозы не наблюдались. В то же время симптомы заболевания на нетрансгенных растениях проявились в срастании листьев между собою, что отмечалось нами ранее [4].

Экспрессия гена секреторных нуклеаз в трансгенных растениях не исключает деградацию вирусоспецифических РНК, что определяет вирусоустойчивость трансгенных растений. Поэтому представляло интерес исследовать геномную РНК ВОГ в генномодифицированных растениях картофеля, экспрессирующих ген рибонуклеазы *Z. elegans*. С этой целью был получен вирусный препарат из генномодифицированных растений картофеля [5], затем из вирусного препарата была выделена геномная РНК [6] и исследована методом электрофореза в агарозе [7]. В результате проведенных исследований установлено, что трансгенные растения содержали геномную РНК ВОГ, которая по своим размерам и спектрофотометрическим характеристикам не отличалась от геномной РНК ВОГ, изолированной из нетрансгенных растений (рис. 1).

Кроме того, была выделена суммарная РНК из трансгенных и контрольных растений картофеля [8]. При исследовании суммарного состава РНК в трансгенных растениях картофеля через 2 недели после их инфицирования вирусом была обнаружена высокомолекулярная РНК, которая также присутствовала, но в гораздо большем количестве, в составе

суммарных РНК из инфицированных вирусом нетрансгенных растений. В то же время в неинфицированных вирусом трансгенных и нетрансгенных растениях картофеля высокомолекулярную РНК не выявили (рис. 2). Обращает на себя внимание тот факт, что высокомолекулярные РНК (10379–10415 нуклеотидов), обнаруженные лишь в инфицированных растениях, отличаются меньшими размерами от геномной РНК, изолированной из очищенного вирусного препарата (11575 нуклеотидов). Мы не исключаем, что на это обстоятельство повлияли клеточные факторы, присутствующие при выделении суммарной РНК.

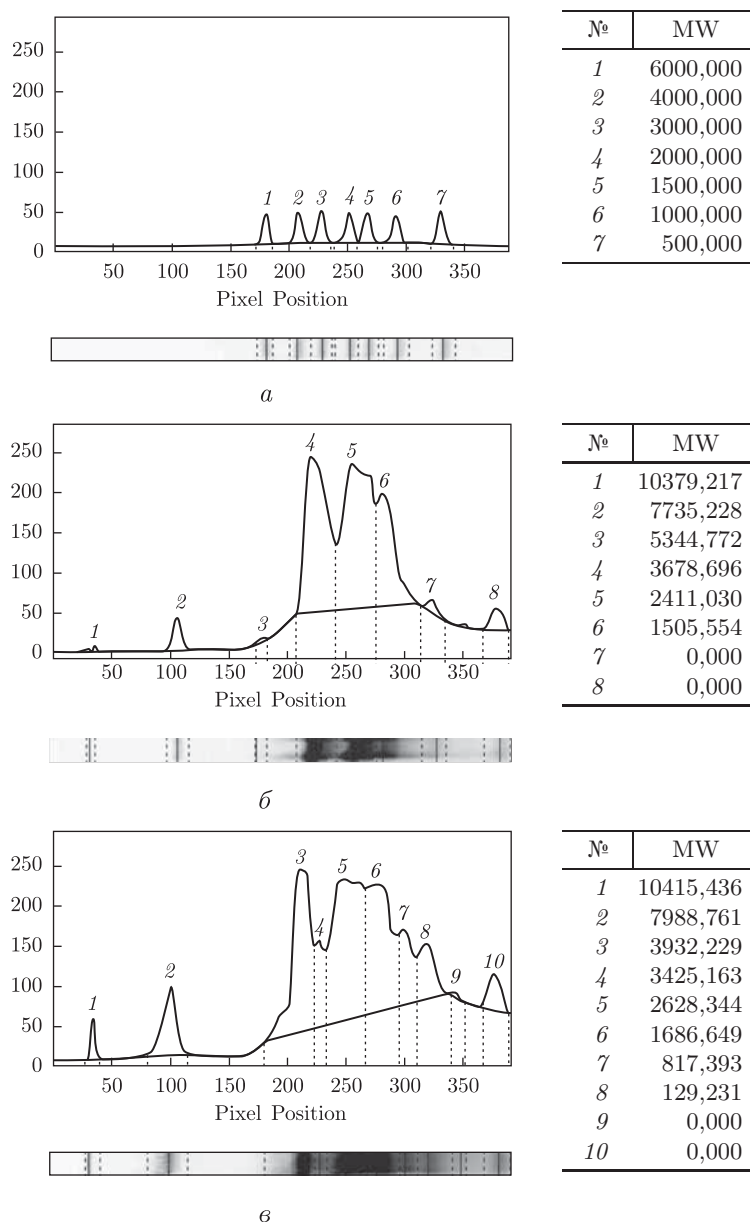


Рис. 2. Денситограмма РНК: а — маркеры; б — из трансгенных растений картофеля, инфицированных ВОГ; в — из нетрансгенных растений картофеля, инфицированных ВОГ; г — из контрольных трансгенных растений; д — из контрольных нетрансгенных растений

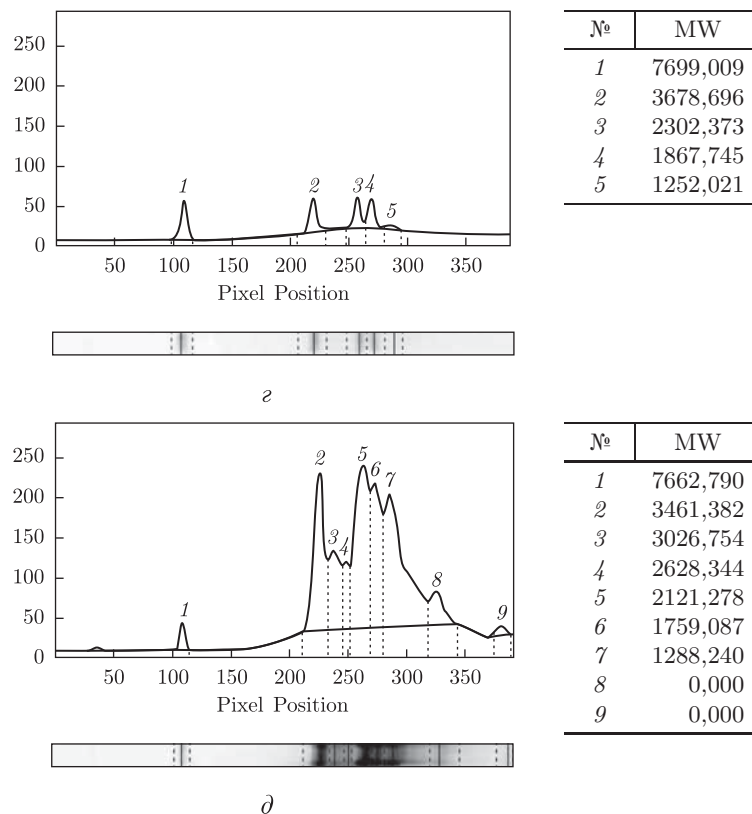


Рис. 2. Продолжение

Следует отметить, что количественный уровень содержания РНК как в инфицированных ВОГ, так и в контрольных трансгенных растениях ниже по сравнению с ее суммарным количеством в нетрансгенных растениях. Это, возможно, свидетельствует о том, что при повышенном уровне РНКаз в трансгенных растениях снижается содержание РНК.

Как выяснилось, уровень накопления вируса в трансгенных растениях картофеля, экспрессирующих ген рибонуклеазы циннии, ниже в 1,7 раза на 14 сут, в 1,4 раза на 21 сут после заражения по сравнению с таковым в нетрансгенных растениях картофеля.

Ранее мы отмечали, что трансгенные растения табака, экспрессирующие ген экстраклеточной РНКазы из циннии, менее устойчивы к ВОГ по сравнению с трансгенными растениями табака, экспрессирующими ген панкреатической рибонуклеазы быка, и было показано трехкратное снижение репродукции вируса по сравнению с контрольными растениями [3]. И в нашем случае, согласно полученным данным, отмечается повышенный уровень устойчивости к ВОГ трансгенных растений картофеля, экспрессирующих ген рибонуклеазы циннии, что представляет значительный интерес для дальнейших исследований молекулярных механизмов устойчивости растений.

1. Трифонова Е. А., Кочетов А. В., Шумный В. К. Молекулярные механизмы системной устойчивости растений к вирусным инфекциям и способы повышения вирусостойчивости путем трансгеноза // Успехи соврем. биологии. – 2007. – 127, № 1. – С. 13–24.
2. Trifonova E. A., Sapotcky V. K., Komarova M. L., Sherban A. B., Shumny V. K., Polyakova A. M., Lapshina L. A., Kochetov A. V., Malinovsky B. I. Protection of transgenic tobacco plants expressing bovine pancreatic ribonuclease against tobacco mosaic virus // Plant Cell Rep. – 2007. – No 7. – P. 1121–1126.

3. Spivak N. Ya., Kochetov A. V., Lozova O. I., Levenko B. A., Yuzvenko L. V., Nikolaychuk M. V., Levchuk O. B., Didenko L. F., Trifonova E. A., Sangaev S. S. Sensibility to phytorhabdoviruses of transgenic tobacco plants // *Наук. вісн. Ужгород. ун-ту. Сер. Біологія.* – 2010. – Вип. 27. – С. 37–39.
4. Шевчук В. К., Довгань С. В., Діденко Л. Ф., Демченко О. А., Юзвенко Л. В., Серденко О. Б., Співак М. Я. Вірусний опік гречки в Україні // *Карантин і захист рослин.* – 2008. – № 11. – С. 13–15.
5. Діденко Л. Ф., Пархоменко Н. И., Максименко Л. А. и др. Некоторые свойства структурных компонентов фиторабдовируса курчавой карликовости картофеля // *Биополимеры и клетка.* – 2001. – № 4. – С. 308–313.
6. Steele K. P., Frist R. H. Characterization of the 3' Termini of the RNAs of Cowpea Mosaic Virus // *J. Virol.* – 1978. – **26**, No 2. – P. 243–248.
7. Duncan R. S. Agarose Gel Electrophoresis // *Basic DNA and RNA Protocols* / Ed. A. J. Harwood. – New York: Humana, 1996. – Vol. 58. – P. 17–21.
8. Bugos R. C., Chiang V. L., Zhang X. H. et al. RNA isolation from plant tissues recalcitrant to extraction in guanidine // *BioTechniques.* – 1995. – **19**. – P. 734–737.

*Институт микробиологии и вирусологии
им. Д. К. Заболотного НАН Украины, Киев
Институт цитологии и генетики СО РАН,
Новосибирск, Россия*

Поступило в редакцию 12.03.2012

**Член-кореспондент НАН України М. Я. Співак, О. В. Кочетов, О. Й. Лозова,
Л. В. Юзвенко, Т. Ю. Сабірова, О. А. Демченко, Л. Ф. Діденко**

Сприйнятливість трансгенних рослин картоплі до вірусу опіку гречки

Візуальна оцінка інфікованих вірусом опіку гречки (ВОГ) трансгенних і нетрансгенних рослин картоплі показала, що трансгенні рослини, які експресують ген рибонуклеази цинії, характеризувалися підвищеною стійкістю до ВОГ. В інфікованих і неінфікованих ВОГ трансгенних рослинах картоплі відзначався знижений рівень вмісту сумарних РНК порівняно з відповідним контролем. Рівень накопичення вірусу в трансгенних рослинах на 14 добу після інфікування був нижче в 1,7 раза порівняно з таким у нетрансгенних рослинах.

**Corresponding Member of the NAS of Ukraine N. Ya. Spivak, A. V. Kochetov,
I. O. Lozova, L. V. Yuzvenko, T. Yu. Sabirova, A. A. Demchenko, L. F. Didenko**

The sensibility of transgenic plants of potato to buckwheat burn virus

*Visual assessment of BBV-infected transgenic and non-transgenic potato plants has shown that the transgenic potato plants that express a gene of ribonuclease of *Zinnia elegans* are characterized by increased resistance to BBV. Infected and uninfected virus transgenic potato plants are characterized by reduced levels of total RNA as compared with control. The level of accumulation of the virus content in transgenic potato plants in 14 days after infection was lower by 1.7 times as compared with its content in non-transgenic potato plants.*



УДК 577.3.536

© 2012

А. В. Чалый

Синергетическое подобие процессов нуклеации и канцерогенеза: следствия и перспективы

(Представлено академиком НАН Украины В. Ф. Чехуном)

На основе синергетического подобия процессов нуклеации и канцерогенеза предложен один из возможных механизмов предотвращения роста раковых новообразований. Этот механизм основывается на прямо пропорциональной зависимости критического размера $R_{кр}$ зародыша новой фазы (патологического новообразования) от коэффициента поверхностного натяжения σ , т. е. $R_{кр} \sim \sigma$, и нелинейной кубической зависимости работы образования критического зародыша (нуклеационного барьера) $W(R_{кр})$ от σ , т. е. $W(R_{кр}) \sim \sigma^3$. На этой принципиальной основе предложено с целью воспрепятствовать процессу роста патологических новообразований использовать поверхностно-ин-активные вещества, которые увеличивают коэффициент поверхностного натяжения. Тем самым растущие за критические зародыши, имеющие размеры $R > R_{кр}$ при исходном значении σ_0 , переводятся в докритические зародыши размером $R < R_{кр}$ при новом значении $\sigma_1 > \sigma_0$, которые должны самопроизвольно исчезнуть. Этот же механизм лежит в основе канцерогенного действия поверхностно-активных веществ, которые уменьшают коэффициент поверхностного натяжения и способствуют росту патологических новообразований, переводя зародыши из докритического состояния в за критическое, в котором они начинают неудержимо расти.

1. Синергетика, как междисциплинарное научное направление, изучающее процессы самоорганизации и образования упорядоченных структур, использует принципиальное сходство главных особенностей исследуемых явлений, происходящих в открытых системах различной природы (см., например, [1–3]). Большинство достижений синергетического подхода связано в значительной степени с возможностью перенесения результатов одной науки (например, физики), как правило, более точной в силу пренебрежения многими деталями, которые вначале можно считать несущественными, на объекты другой науки (например, медицины), которые являются более сложными и которые потому удастся описать скорее на качественном, чем количественном, уровне. Примером может служить определенная аналогия между процессами, происходящими в периодической химической реакции Белоусова–Жаботинского и в миокарде при нарушении его однородности по периоду рефрактерности.

Размножение спиральных волн (ревербераторов) в этих абсолютно различных по своей природе системах позволяет получить новую информацию относительно причин возникновения фибрилляции [4].

В данной работе приведены результаты исследования синергетического подобию, с одной стороны, процесса нуклеации, присходящего в метастабильной области системы жидкость–пар, и, с другой стороны, процесса канцерогенеза, что открывает определенные перспективы предотвращения раковых новообразований.

2. На ранних стадиях процесса формирования новообразований зародыши новой фазы являются фрактальными объектами, которые имеют разветвленную форму и поэтому значительную поверхностную площадь. Выводы относительно фрактальной природы кластеров новой фазы подтверждаются исследованиями, которые основываются на компьютерном моделировании. Еще одним доказательством этого факта является то, что среднеквадратическая флуктуация числа частиц $\langle \Delta N^2 \rangle$ в зародышах новой фазы непосредственно определяется фрактальной размерностью D такого кластера [5]. Действительно,

$$\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2} \sim (N^2 / V k_B T \chi)^{1/2} = V^{1/2} \rho (k_B T \chi)^{1/2}, \quad (1)$$

где χ — изотермическая сжимаемость (восприимчивость) в объеме $V = L^d$ исследуемой системы с характерным линейным размером L и пространственной размерностью d .

В общем случае величина $\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2}$ имеет достаточно сложную зависимость от линейного размера кластера L . Если далеко от критических (бифуркационных) точек среднеквадратическая флуктуация числа частиц $\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2} \sim L^{d/2}$ определяется пространственной размерностью d , то вблизи этих точек возрастающая роль флуктуационных эффектов изменяет размерную зависимость $\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2}$ радикально. В обзорной статье [5] была предложена классификация различных фазовых состояний в системе жидкость–пар и показано, что флуктуационные эффекты следует принимать во внимание в процессах зарождения новой фазы при гомогенном (однородном) или гетерогенном (неоднородном, связанном с наличием поверхностей, примесей, загрязнений) зародышеобразовании в метастабильной области, особенно вблизи границы устойчивости (спинодали). Флуктуационные эффекты становятся также важными и при фазовом расслоении термодинамически неустойчивой системы по механизму спиноподобного распада, когда в такой системе происходит образование фаз, различающихся своей плотностью и структурой.

Использование гипотезы скейлинга для пространственно ограниченных систем [6–8] (зародыши новой фазы являются именно такими объектами) позволяет записать следующую формулу для восприимчивости χ :

$$\chi = L^{\gamma/\nu} f_\chi(A\tau L^{1/\nu}, BhL^{\beta/\nu}), \quad (2)$$

где $f_\chi(x, y)$ — масштабная функция; A и B — неуниверсальные константы; β , γ , ν — критические индексы; $\tau = (T - T_c)/T_c$ — температурная переменная, отсчитанная от критической температуры T_c ; h — внешнее поле, сопряженное параметру порядка исследуемой системы.

На основании формул (1) и (2) для среднеквадратической флуктуации числа частиц получаем

$$\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2} = L^D f_N(A\tau L^{1/\nu}, BhL^{\beta/\nu}), \quad (3)$$

где D — фрактальная размерность, которая определяется формулой Мандельброта $D = d - \beta/\nu$. Для получения (3) использованы скейлинговые равенства между критическими индексами $\gamma = (2 - \eta)\nu$, $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, $d\nu = 2 - \alpha$.

Таким образом, формула (3) показывает, что масштабное преобразование величины $\langle \Delta N^2 \rangle^{1/2}$ характеризуется критическим индексом, который в точности равняется фрактальной размерности зародыша новой фазы.

3. Дальнейший рост фрактальных кластеров для систем со скалярным параметром порядка и центрально-симметричным потенциалом межмолекулярного взаимодействия приводит к тому, что зародыши новой фазы достаточно быстро достигают сферической формы.

Рассмотрим некоторые (существенные для нашего исследования) особенности процесса зарождения новой фазы при фазовых переходах в системе жидкость–пар [9–12]. Для этого воспользуемся следующей формулой для минимальной работы (энергии) W , необходимой для создания сферического зародыша новой фазы радиуса R :

$$W(R) = -\frac{4}{3}\pi R^3 \delta\mu \delta\rho_{\text{КС}} + 4\pi\sigma R^2, \quad (4)$$

где $\delta\mu = \mu(\rho, T) - \mu(\rho_{\text{КС}}, T)$ — степень пересыщения метастабильного пара в стабильной жидкости или перегрева метастабильной жидкости в стабильном паре; $\delta\rho_{\text{КС}} = [\rho_{\text{КС}}(T) - \rho_c] / \rho_c$ — значение параметра порядка на кривой сосуществования (КС), $\rho_{\text{КС}}(T)$ и ρ_c — плотность пара (жидкости) вдоль КС и в критической точке; σ — коэффициент поверхностного натяжения. Первое и второе слагаемые в формуле (4) определяют соответственно объемный и поверхностный вклады в минимальную работу образования зародыша новой фазы.

На основании формулы (4) легко рассчитать критический размер $R_{\text{кр}}$ и минимальную работу $W(R_{\text{кр}})$ для создания критического зародыша новой фазы:

$$R_{\text{кр}} = 2\sigma / \delta\mu \delta\rho_{\text{КС}}, \quad (5)$$

$$W(R_{\text{кр}}) = 16\pi\sigma^3 / 3(\delta\mu)^2 (\delta\rho_{\text{КС}})^2 = 4\pi\sigma R_{\text{кр}}^2 / 3. \quad (6)$$

Следует обратить внимание на линейную пропорциональность критического размера $R_{\text{кр}}$ коэффициенту поверхностного натяжения σ , а также кубическую зависимость между $W(R_{\text{кр}})$ и σ . Это важное обстоятельство будет использовано в дальнейшем.

Минимальную работу W образования зародыша новой фазы удобно представить в виде следующего разложения по степеням отклонения размера зародыша R от критического значения $R_{\text{кр}}$:

$$W(R) = W(R_{\text{кр}}) - 4\pi\sigma(R - R_{\text{кр}})^2 - \frac{4\pi}{3}\delta\mu\delta\rho_{\text{КС}}(R - R_{\text{кр}})^3. \quad (7)$$

Интересно отметить, что разложение (7) является точным, поскольку все старшие производные $W^{(n)}(R_{\text{кр}}) = 0$, начиная с $n \geq 4$.

На рис. 1 приведен схематический график зависимости $W(R)$. Сплошная кривая соответствует некоторому исходному значению коэффициента поверхностного натяжения σ_0 . Как видно из этого рисунка и как следует из формулы (7), работа образования $W(R)$ зародыша новой фазы достигает своего максимального значения при $R_{\text{кр}}^{(0)} = 2\sigma_0 / \delta\mu\delta\rho_{\text{КС}}$ и обращается в нуль при $R = 0$ и $R = R_{\text{мах}}$, где $R_{\text{мах}} = 3\sigma_0 / \delta\mu\delta\rho_{\text{КС}} = 3R_{\text{кр}}^{(0)} / 2$ — максимально достижимый размер зародыша новой фазы при заданных значениях коэффициента поверхностного натяжения σ_0 , а также величин $\delta\mu$ и $\delta\rho_{\text{КС}}$, которые характеризуют глубину вторжения в метастабильную область.

4. Рассмотрим зависимость основных характеристик $R_{\text{кр}}$ и $W(R_{\text{кр}})$ процесса зарождения новой фазы от термодинамических переменных (температуры, параметра порядка —

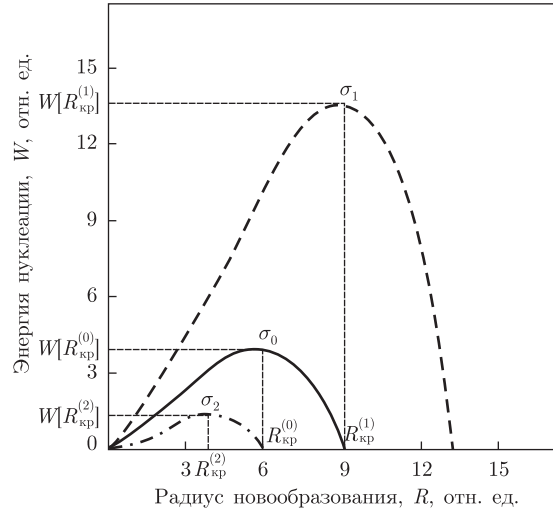


Рис. 1

плотности или концентрации, давления, других плотностных и полевых переменных). Из формул (5), (6) следует, что вдали от критических (бифуркационных) точек и границы устойчивости (спинодали) возрастание критического размера зародыша $R_{кр}$ и минимальной работы его образования $W(R_{кр})$ обусловлено, во-первых, увеличением коэффициента поверхностного натяжения σ ; во-вторых, уменьшением степени пересыщения пара (перегрева жидкости) $\delta\mu$ и значения параметра порядка $\delta\rho_{кс}$ на кривой сосуществования.

По мере приближения к критическим (бифуркационным) точкам или границе устойчивости критический размер зародыша растет как радиус корреляции флуктуаций параметра порядка ξ в соответствии с формулой $R_{кр} \sim \tau^{-\nu}$, где $\tau = (T - T_c)/T_c$ — отклонение температуры от критического значения. Данный вывод основывается не только на размерных соображениях, но и на следующих соотношениях теории масштабной инвариантности (скейлинга) [13]: $\sigma \sim \tau^{(d-1)\nu}$, $\delta\mu \sim \tau^{\beta\delta}$, $\delta\rho_{кс} \sim \tau^\beta$, $\beta(\delta + 1) = \gamma + 2\beta = 2 - \alpha = d\nu$. Для систем, входящих в класс универсальности трехмерной модели Изинга, критические индексы принимают такие численные значения: $\alpha \approx 0,11$, $\beta \approx 0,33$, $\gamma \approx 1,24$, $\delta \approx 4,5$, $\nu \approx 0,63$. Зависимость критического размера $R_{кр}$ от других термодинамических переменных определяется такими формулами: а) $R_{кр} \sim \varphi^{-\nu/\beta}$, где φ — параметр порядка, роль которого для жидких систем выполняют $\Delta\rho = (\rho - \rho_c)/\rho_c$ или $\Delta x = (x - x_c)/x_c$ — отклонения плотности ρ или концентрации x от критических значений ρ_c , x_c ; б) $R_{кр} \sim \Delta p^{-\nu/\beta\delta}$, где $\Delta p = (p - p_c)/p_c$ — отклонение давления от критического значения p_c ; в) $R_{кр} \sim \Delta h^{-\nu/\beta\delta}$, где $\Delta h = (h - h_c)/h_c$ — отклонение внешнего поля h , сопряженного параметру порядка φ , от критического значения h_c .

Что касается максимального значения нуклеационного барьера или работы образования $W(R_{кр})$ зародыша новой фазы, то можно показать, что эта величина не имеет особенности в критической (бифуркационной) точке или на границе устойчивости, поскольку $W(R_{кр}) \sim \sigma R_{кр}^2 \sim \tau^{(d-1)\nu} \xi^2 \sim \tau^0$. Вместе с тем необходимо упомянуть следующий важный результат [14]: минимальная работа образования зародыша новой фазы обратно пропорциональна числу Гинзбурга, т. е. $W(R_{кр}) \sim Gi^{-1}$. Это означает, что для систем, в которых выполняется приближение среднего поля Ландау, число Гинзбурга является достаточно малым ($Gi \ll 1$), а нуклеационный барьер — наоборот, достаточно высоким ($W(R_{кр}) \gg 1$). Та-

ким образом, процесс образования новой фазы может оказаться энергетически невыгодным даже при глубоких вторжениях в метастабильную область для подобных систем с малым числом Гинзбурга, примерами которых являются жидкие кристаллы, некоторые полимерные соединения и другие объекты с дальнедействующим потенциалом межмолекулярного взаимодействия.

5. Изучение динамики процесса зарождения новой фазы выявило следующие его особенности: а) если размер зародыша новой фазы R меньше критического размера $R_{кр}$ (см. рис. 1), то энергетически выгодный процесс заключается в дальнейшем уменьшении размера R , т. е. такие докритические зародыши самопроизвольно исчезают; б) если же имеет место обратная ситуация, т. е. $R > R_{кр}$, то такие закритические зародыши начинают расти.

Чрезвычайно важным примером, который иллюстрирует подобный механизм процесса зарождения новой фазы, является *канцерогенез*. Обзору современных тенденций в этой области посвящено очень большое число работ (в частности, см. [15]).

Используя синергетические принципы, которые базируются на универсальных представлениях современной физики фазовых переходов, можно сформулировать необходимые условия, выполнение которых способно предотвратить процесс формирования и неудержимого роста патологических новообразований, а именно:

- 1) увеличение значения критического размера $R_{кр}$ зародыша новой фазы, который перерастает в злокачественную опухоль;
- 2) создание более высокого нуклеационного барьера $W(R_{кр})$, который необходимо преодолеть для возникновения дееспособных зародышей и дальнейшего роста таких закритических зародышей.

Как уже отмечалось выше в связи с формулами (5) и (6), величина критического размера $R_{кр}$ прямо пропорциональна коэффициенту поверхностного натяжения σ , т. е. $R_{кр} \sim \sigma$, а величина нуклеационного барьера $W(R_{кр})$ прямо пропорциональна кубу коэффициента поверхностного натяжения σ , т. е. $W(R_{кр}) \sim \sigma^3$. Таким образом, чтобы воспрепятствовать процессу роста патологических новообразований, необходимо использовать соответствующие поверхностно-инактивные вещества, которые увеличивают коэффициент поверхностного натяжения σ .

Рис. 1 (штриховая кривая) иллюстрирует этот принципиальный вывод. При увеличении коэффициента поверхностного натяжения σ_1 на 50% по сравнению с его исходным значением σ_0 , т. е. при $\sigma_1 = 1,5\sigma_0$, критический размер также возрастает в 1,5 раза: $R_{кр}^{(1)} = 1,5R_{кр}^{(0)}$. Это означает, что все новообразования с размерами R , лежащими в интервале $R_{кр}^{(0)} < R < R_{кр}^{(1)}$ и которые при исходном значении коэффициента поверхностного натяжения σ_0 были закритическими, т. е. росли, теперь при новом большем значении коэффициента поверхностного натяжения σ_1 становятся докритическими, т. е. должны самопроизвольно исчезнуть. Нуклеационный барьер $W(R_{кр})$ при новом значении $\sigma_1 = 1,5\sigma_0$ возрастает по величине в $1,5^3 = 3,375$ раза, что подтверждает энергетическую невыгодность возникновения патологических новообразований с увеличением коэффициента поверхностного натяжения.

Другой важный вывод касается использования поверхностно-активных веществ, которые снижают коэффициент поверхностного натяжения. Как видно из рис. 1 (штрихпунктирная кривая), уменьшение σ_2 на 50%, т. е. при $\sigma_2 = 0,667\sigma_0$, приводит к тому, что критический размер уменьшается в столько же раз $R_{кр}^{(2)} = 0,667R_{кр}^{(0)}$, а новый нуклеа-

ционный барьер резко снижается и становится равным $W(R_{кр}^{(2)}) = 0,296W(R_{кр}^{(0)})$. Таким образом, все зародыши с размерами в интервале $R_{кр}^{(2)} < R < R_{кр}^{(0)}$, которые были докритическими при исходном значении коэффициента поверхностного натяжения σ_0 и поэтому самопроизвольно рассасывались, теперь при новом меньшем значении коэффициента поверхностного натяжения σ_2 становятся закритическими и начинают расти. *Отсюда следует, что применение поверхностно-активных веществ, которые уменьшают коэффициент поверхностного натяжения, способствует процессу роста патологических новообразований.*

В заключение следует подчеркнуть, что здесь сознательно не акцентировалось внимание на конкретных поверхностно-инактивных веществах. Безусловно, выбор наиболее эффективных и нетоксических противоопухолевых препаратов, способных увеличивать коэффициент поверхностного натяжения, требует проведения тщательных экспериментальных исследований и клинических испытаний. Вместе с тем очевидное синергетическое подобие процессов зарождения новой фазы в физико-химических и медико-биологических системах вселяет уверенность, что методы синергетики могут оказаться полезными для более глубокого понимания и решения проблем канцерогенеза.

Автор выражает благодарность за внимание к данной работе академикам НАН Украины Л. А. Булавину и В. Ф. Чехуну, а также всем тем, кто принял участие в обсуждении результатов исследования в Институте экспериментальной патологии, онкологии и радиобиологии им. Р. Е. Кавецкого НАН Украины.

1. Хакен Г. Синергетика. – Москва: Мир, 1980. – 405 с.
2. Сугаков В. Й. Основы синергетики. – Київ: Оберіг, 2001. – 287 с.
3. Чалый О. В. Синергетичні принципи освіти та науки. – Київ: Віпол, 2000. – 253 с.
4. Винер Н., Розенблут А. Проведение импульсов в сердечной мышце // Кибернетический сборник. Вып. 3. – Москва: Изд-во иностр. лит-ры, 1961. – С. 7–56.
5. Бойко В. Г., Могель Х.-Й., Сысоев В. М., Чалый А. В. Особенности метастабильных состояний при фазовых переходах жидкость–пар // Успехи физ. наук. – 1991. – **161**. – С. 77–111.
6. Фишер М. Критические явления // Устойчивость и фазовые переходы: Пер. с англ. – Москва: Мир, 1973. – С. 245–369.
7. Binder K. Phase transitions in reduced geometry // Annu. Rev. Phys. Chem. – 1992. – **43**. – P. 33–59.
8. Чалый О. В., Лукомський В. П., Ганджа І. С., Цехмістер Я. В., Чалый К. О. Нелінійні процеси в фізиці. – Київ: Четверта хвиля, 2005. – 359 с.
9. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. – Москва: Наука, 1976. – 584 с.
10. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. – Москва: Наука, 1979. – 528 с.
11. Скрипов В. П. Метастабильная жидкость. – Москва: Наука, 1972. – 312 с.
12. Чалый А. В. Неравновесные процессы в физике и биологии. – Киев: Наук. думка, 1997. – 183 с.
13. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – Москва: Наука, 1982. – 382 с.
14. Binder K., Evans R., Landau D. P., Ferrenberg A. M. Interface localization transition in Ising films with competing walls: Ginzburg criterion and crossover scaling // Phys. Rev. E. – 1996. – **53**. – P. 5023–5034.
15. Онкологія. Вибрані лекції для студентів і лікарів / За ред. В. Ф. Чехуна. – Київ: Здоров'я України, 2010. – 768 с.

О. В. Чалий

Синергетична подібність процесів нуклеації та канцерогенезу: наслідки і перспективи

На основі синергетичної подібності процесів нуклеації та канцерогенезу запропонований один з можливих механізмів запобігання росту ракових новоутворень. Цей механізм спирається на прямо пропорційну залежність критичного розміру $R_{кр}$ зародка нової фази (патологічного новоутворення) від коефіцієнта поверхневого натягу σ , тобто $R_{кр} \sim \sigma$, та нелінійну кубічну залежність роботи утворення критичного зародка (нуклеаційного бар'єру) $W(R_{кр})$ від σ , тобто $W(R_{кр}) \sim \sigma^3$. На цій принциповій основі запропоновано з метою перешкодження процесу росту патологічних новоутворень використовувати поверхнево-інактивні речовини, які збільшують коефіцієнт поверхневого натягу. Тим самим закритичні зародки, що ростуть і які мають розміри $R > R_{кр}$ при вихідному значенні σ_0 , переводяться у докритичні зародки з розмірами $R < R_{кр}$ при новому значенні $\sigma_1 > \sigma_0$, які повинні самовільно зникати. Цей же механізм лежить в основі канцерогенної дії поверхнево-активних речовин, які зменшують коефіцієнт поверхневого натягу та сприяють росту патологічних новоутворень, переводячи зародки з докритичного стану в закритичний, в якому вони починають нестримно рости.

A. V. Chalyi

Synergetic similarity of nucleation and cancer genesis processes: consequences and perspectives

Similarity of nucleation and cancer genesis processes is used to propose one of the possible mechanisms to prevent the formation of oncological tumors. This mechanism is based on a linear proportionality in the dependence of the critical size R_{cr} of a new phase nucleus on the coefficient of surface tension σ , i. e. $R_{cr} \sim \sigma$, and a nonlinear cubic dependence of the nucleation barrier (work to create a critical nucleus) $W(R_{cr})$ on σ , i. e. $W(R_{cr}) \sim \sigma^3$. This principal background gives a possibility to prevent new oncological formations due to using surface-inactive substances, which increase the coefficient of surface tension. Therefore, the growing above-critical nuclei with sizes $R > R_{cr}$ at certain value σ_0 can be transformed to sub-critical nuclei with sizes $R < R_{cr}$ at a new value $\sigma_1 > \sigma_0$ and should disappear. The same mechanism may explain the cancer generous action of surface-active substances, which decrease the coefficient of surface tension and stimulate the growth of new oncological formations due to the crossover of sub-critical nuclei into the above-critical state.