



ОПОВІДІ
НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК
УКРАЇНИ

9 • 2013

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, 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, 2013

Зміст

Математика

| | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Бойко В. М., Попович Р. О.</i> Умовні симетрії лінійного рівняння стрижня | 7 |
| <i>Болотов Д. В.</i> Топологія плоских слоєних коразмерности один | 16 |
| <i>Горбачук М. Л., Горбачук В. М.</i> Зображення груп лінійних операторів у банаховому просторі степеневими рядами | 22 |
| <i>Дашкова О. Ю.</i> Модулі над груповими кільцями обобщенно разрешимых групп | 29 |
| <i>Курдаченко Л. А., Субботін І. Я., Чупордя В. А., Гринь К. О.</i> Про деякі питання теорії фаззі-груп | 33 |

Інформатика та кібернетика

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Ляшко С. І., Ляшко В. С., Нееежмаков П. І., Зуб С. І., Зуб С. С.</i> Грід-технологія для завдань метрології | 38 |
| <i>Максимец А. Н.</i> Поиск программных инвариантов в виде полиномов | 44 |
| <i>Малик І. В.</i> Збіжність у схемі усереднення диференціально-функціональних рівнянь нейтрального типу | 51 |

Механіка

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Аврамов К. В.</i> К аэроупругому взаимодействию пластин с безвихревым идеальным газовым потоком | 57 |
| <i>Волкова О. С.</i> Аналог решения Стеклова в задаче о движении тяжелого гиростата с переменным гиростатическим моментом | 65 |
| <i>Хорошун Л. П.</i> Гидродинамическая теория экспериментального определения скорости эфирного ветра на основе эффекта первого порядка | 71 |
| <i>Шульга М. О., Карлаш В. Л.</i> Амплітудно-фазові характеристики радіальних коливань тонкого п'єзокерамічного диска біля резонансів | 80 |

Фізика

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Баранський П. І., Бабич В. М., Гайдар Г. П.</i> Концентраційна залежність тензоопору монокристалів n -Si | 87 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

Теплофізика

| | |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| <i>Долінський А. А., Шурчкова Ю. А.</i> Вода в условиях обработки путем дискретно-импульсного ввода энергии | 93 |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

Матеріалознавство

- Тимошенко Я. Г., Гадзиря М. П., Гнесін Г. Г., Давидчук Н. К., Галямін В. Б.* Створення наноструктурованої перлітної сталі шляхом легування заліза наноконпозиційним порошком на основі нестехіометричного карбїду кремнію 101

Науки про Землю

- Белевцев Р. Я.* О термодинамическом анализе изотопного обмена в воде гидросферы и земной коры 108
- Дубовенко Ю. І.* Про визначення початкового наближення для контактної задачі 115
- Іванов Б. Н., Михальченко І. І., Синицин В. О., Загородній В. В.* Речовинне перетворення дайок діабазу в ореолі апогранітних лужних натрієвих метасоматитів 122
- Шульга Т. Я.* Исследование стационарного движения стратифицированной жидкости, вызываемого действием ветра в Азовском море 129

Хімія

- Алексеева Т. Т., Гомза Ю. П., Мартынюк И. С., Клепко В. В., Несин С. Д.* Структурные особенности органо-неорганических ВПС на основе сетчатого полиуретана и Ті-содержащего сополимера 136
- Запорожець О. А., Кеда Т. Є., Коваленко Л. В., Тилтіна Л. І., Сухан В. В.* Іммобілізований 1-(4-адамантил-2-гіазолілазо)-2-нафтол — твердофазний реагент на цинк (ІІ) 142
- Косинская А. П., Огниченко Л. Н., Муатс А., Кузьмина А. В., Ларионов В. Б., Кузьмин В. Е.* QSAR-анализ проникающей способности органических веществ относительно поверхности гематоэнцефалического барьера 147
- Лозинський О. О., Шокол Т. В., Хилья В. П.* Взаємодія 7-гідрокси-8-формілхромонів і 8-іміно(оксо)-4Н-пірано[2,3-*f*]хромен-4-онів з нуклеофілами 151

Біологія

- Берестяная А. Н.* Влияние острого рентгеновского облучения на эпигеном в ходе онтогенеза *Linum usitatissimum* 157
- Сарнацкая В. В.* Взаимодействие функционализированных олеиновой кислотой и полиэтиленгликолем наночастиц Fe₃O₄ с альбумином 164

Біохімія

- Шмараков І. О., Морозевич Ю. Д., Бленер В. С., Марченко М. М.* Біохімічні аспекти сигнальної функції ретиноїдів при регенерації печінки 172
- Цудзевич Б. О., Калінін І. В.* Вплив солей міді на функціонування антиоксидантної системи у тканинах щурів 179

Медицина

- Вишневецька О. А., Большова О. В., Тронько М. Д.* Вплив замісної терапії препаратами рекомбінантного гормону росту на стан гіпофізарно-тиреоїдної та гіпофізарно-наднирковозалозної систем у дітей допубертатного віку з соматотропною недостатністю 184
- Шеметун О. В.* Модифікація радіаційно-індукованого цитогенетичного ефекту в лімфоцитах периферичної крові людини з використанням антиоксидантного вітамінного препарату 191

Contents

Mathematics

- Bojko V. M., Popovych R. O.* Conditional symmetries of the linear rod equation 7
- Bolotov D. V.* Topology of flat codimension one foliations 16
- Gorbachuk M. L., Gorbachuk V. M.* Representation of groups of linear operators on a Banach space by means of power series 22
- Dashkova O. Yu.* Modules over group rings of generalized soluble groups 29
- Kurdachenko L. A., Subbotin I. Ya., Chupordya V. A., Grin K. O.* On some questions in the theory of fuzzy groups 33

Information Science and Cybernetics

- Lyashko S. I., Lyashko V. S., Neyezhnikov P. I., Zub S. I., Zub S. S.* Grid technology for metrology tasks 38
- Maksymets O. M.* Polynomial invariants generation of programs 44
- Malyk I. V.* Convergence in the averaging scheme for differential-functional equations of neutral type 51

Mechanics

- Avramov K. V.* Aeroelastic interaction of plates with a three-dimensional inviscid potential gas flow 57
- Volkova O. S.* An analog for Steklov's solution to the problem of motion of a heavy gyrostator with variable gyrostatic momentum 65
- Khoroshun L. P.* Hydrodynamic theory of experimental determination of the ether wind speed on the basis of a first-order effect 71
- Shul'ga M. O.*, *Karlash V. L.* Amplitude-phase characteristics of radial vibrations of a thin piezoceramic disk near resonances 80

Physics

- Baranskii P. I., Babich V. M., Gaidar G. P.* The concentration dependence of the tensor resistance of *n*-Si single crystals 87

Heat physics

- Dolinskiy A. A., Shurchkova J. A.* Water under the treatment by a discrete-pulse introduction of power 93

Materials science

- Tymoshenko Ya. G., Gadzyra M. P., Gnesin G. G., Davydchuk N. K., Galyamin V. B.* Creation of nanostructured pearlitic steel by the alloying of iron by a nanocomposite powder on the base of non-stoichiometric silicon carbide 101

Geosciences

- Belevtsev R. Ya.* About thermodynamical analysis of the isotope exchange in water of the hydrosphere and the Earth crust 108
- Dubovenko Yu. I.* On the initial approximation definition for a contact problem 115
- Ivanov B. N., Mikhalychenko I. I., Sinitsyn V. A., Zagorodniy V. V.* Mineral and chemical transformations of diabase dykes within the halo of apogranitic alkaline sodium metasomatites 122
- Shul'ga T. Ya.* Study of stationary currents of a stratified fluid caused by wind in the Sea of Azov 129

Chemistry

- Alekseeva T. T., Gomza Yu. P., Martynyuk I. S., Klepko V. V., Nesin S. D.* Structural peculiarities of the organic-inorganic IPN based on crosslinked polyurethane and Ti-containing copolymer 136
- Zaporozhets O. A., Keda T. Ye., Kovalenko L. V., Tyltina L. I., Sukhan V. V.* Immobilized 1-(4-adamantyl-2-thiasolyl-azo)-2-naphthol as a solid-phase reagent for zinc(II) 142
- Kosinskaya A. P., Ognichenko L. N., Muats A., Kuz'mina A. V., Larionov V. B., Kuz'min V. E.* QSAR analysis of blood-brain barrier permeability for organic compounds .. 147
- Lozinski O. O., Shokol T. V., Khilya V. P.* Reaction of 7-hydroxy-8-formylchromones and 8-imino(oxo)-4*H*-pyrano[2,3-*f*]chromen-4,8-diones with nucleophiles 151

Biology

- Berestyanaya A. N.* Effect of hard *X*-ray radiation on the epigenome during ontogenesis of *Linum usitatissimum* 157
- Sarnatskaya V. V.* Interaction of magnetite Fe₃O₄ nanoparticles functionalized with oleic acid and polyethylene glycol with albumin 164

Biochemistry

Shmarakov I. O., Morozevich Yu. D., Blaner W. S., Marchenko M. M. Biochemical aspects of retinoid signaling function during liver regeneration 172

Tsudzevich B. A., Kalinin I. V. Influence of copper salts on the functioning of the antioxidant system in rat tissues 179

Medicine

Vyshnevskaya O. A., Bolshova E. V., Tronko M. D. Influence of replacement growth hormone therapy on pituitary-thyroid and pituitary-adrenal systems in prepubertal children with GH deficiency 184

Shemetun O. V. Modification of radiation-induced cytogenic effects in human peripheral blood lymphocytes using antioxidant vitaminic medicinal product 191

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 03.09.2013. Формат 84×108/16. Ум. друк. арк. 20,58. Обл.-вид. арк. 16.
Тираж 247 прим. Зам. 3681. Ціна 28 грн.

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



УДК 517.95

В. М. Бойко, Р. О. Попович

Умовні симетрії лінійного рівняння стрижня

(Представлено членом-кореспондентом НАН України А. Г. Нікітіним)

Вивчено умовні симетрії (1+1)-вимірного лінійного рівняння стрижня, що ілюструє нову теорему про лінійні оператори редукції лінійних диференціальних рівнянь з частинними похідними.

Для лінійних диференціальних рівнянь з частинними похідними існують добре розвинуті методи побудови їх аналітичних розв'язків, зокрема, метод розділення змінних, різноманітні інтегральні перетворення, ряди Фур'є та їх узагальнення. У той же час дослідження симетрій таких рівнянь є важливим насамперед для розвитку нових методів самого симетрійного аналізу.

У цій роботі досліджено оператори редукції (які називають також неklasичними або умовними симетріями) (1+1)-вимірного лінійного рівняння стрижня зі сталими коефіцієнтами $u_{tt} + \lambda u_{xxxx} = 0$, $\lambda > 0$, для невідомої функції u двох незалежних змінних t й x . Це рівняння описує поперечні коливання еластичного стрижня і є спеціальним випадком рівняння балки (рівняння Ейлера–Бернуллі). Львівські симетрії та загальна проблема еквівалентності для класу рівнянь Ейлера–Бернуллі досліджувалися в роботах [1–3]. Без обмеження загальності, за допомогою масштабних перетворень за змінною t або x , можна покласти $\lambda = 1$, тобто достатньо розглядати рівняння

$$u_{tt} + u_{xxxx} = 0. \quad (1)$$

Деякі прості розв'язки цього рівняння наведено в [4, § 9.2.2]. Його максимальною алгеброю лівської інваріантності є алгебра $\mathfrak{g} = \langle \partial_t, \partial_x, 2t\partial_t + x\partial_x, u\partial_u, h(t, x)\partial_u \rangle$, де $h = h(t, x)$ — довільний розв'язок рівняння (1).

У п. 1 доведено теорему про лінійні оператори редукції загальних лінійних диференціальних рівнянь з частинними похідними. Наступні два пункти одночасно ілюструють і формулювання, і доведення теореми. Опис сингулярних операторів редукції рівняння (1) у п. 2 є вичерпним. На противагу цьому у п. 3 знайдено лише часткові випадки регулярних операторів редукції рівняння (1).

© В. М. Бойко, Р. О. Попович, 2013

1. Лінійні оператори редукції лінійного рівняння. Наведемо спочатку необхідні поняття і результати теорії умовних симетрій згідно з [5–9]. Розглянемо загальне диференціальне рівняння r -го порядку \mathcal{L} вигляду $L(x, u_{(r)}) = 0$ для невідомої функції u від незалежних змінних $x = (x_1, \dots, x_n)$. Тут через $u_{(r)}$ позначено множину всіх похідних функції u відносно x порядку не вище ніж r , включаючи u як похідну нульового порядку. Будь-яке векторне поле Q у розширеному просторі n незалежних змінних x і однієї залежної змінної u має вигляд $Q = \xi^i(x, u)\partial_i + \eta(x, u)\partial_u$, де коефіцієнти ξ^i й η — гладкі функції змінних x та u . Диференційовну функцію першого порядку $Q[u] = \eta - \xi^i u_i$ називають характеристикою векторного поля Q .

Тут і нижче індекс i змінюється від 1 до n ; за індексами, що повторюються, йде підсумовування; $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ — мультиіндекс, $\alpha_i \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$; δ_i — мультиіндекс, i -та компонента якого дорівнює 1, а всі інші компоненти нульові. Нижні індекси у функцій позначають диференціювання за відповідними змінними, $\partial_i = \partial/\partial x_i$ й $\partial_u = \partial/\partial u$. Змінна u_α простору струменів r -го порядку $J^r = J^r(x|u)$ відповідає похідній $\partial^{|\alpha|}u/\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}$, а $u_i \equiv u_{\delta_i}$. Розгляд йде в рамках локально гладкого підходу. Тоді рівняння \mathcal{L} можна інтерпретувати як алгебраїчне рівняння у просторі струменів J^r і ототожнити з многовидом його розв'язків у J^r :

$$\mathcal{L} = \{(x, u_{(r)}) \in J^r \mid L(x, u_{(r)}) = 0\}.$$

Символ $\mathcal{Q}_{(r)}$ використано для позначення многовиду, який визначено всіма диференціальними наслідками характеристичного рівняння $Q[u] = 0$ в J^r , тобто

$$\mathcal{Q}_{(r)} = \{(x, u_{(r)}) \in J^r \mid D_1^{\alpha_1} \dots D_n^{\alpha_n} Q[u] = 0, \alpha_i \in \mathbb{N} \cup \{0\}, |\alpha| < r\},$$

де $D_i = \partial_{x_i} + u_{\alpha+\delta_i} \partial_{u_\alpha}$ — оператор повної похідної за змінною x_i .

Диференціальне рівняння \mathcal{L} називається *умовно інваріантним* відносно векторного поля Q , якщо виконується *критерій умовної інваріантності* $Q_{(r)}L(x, u_{(r)})|_{\mathcal{L} \cap \mathcal{Q}_{(r)}} = 0$ [5, 6, 9], де $Q_{(r)}$ — стандартне продовження векторного поля Q r -го порядку [10]. При цьому Q називають *оператором умовної симетрії* (або Q -умовної симетрії, або неklasичної симетрії і т. д.) рівняння \mathcal{L} .

Рівняння \mathcal{L} є умовно інваріантним відносно векторного поля Q тоді і лише тоді, коли анзац, побудований за Q , редукує \mathcal{L} до диференціального рівняння з $n - 1$ незалежними змінними [9]. Тому оператори умовної симетрії рівняння \mathcal{L} коротко називають *операторами редукції* цього рівняння.

Оператори редукції \tilde{Q} й Q *еквівалентні*, $\tilde{Q} \sim Q$, якщо вони відрізняються на множник, який є ненульовою функцією змінних x й u : $\tilde{Q} = \lambda Q$, де $\lambda = \lambda(x, u) \neq 0$. Оператори редукції \tilde{Q} й Q еквівалентні відносно групи точкових перетворень G , якщо існує $g \in G$, для якого оператори Q і $g_*\tilde{Q}$ еквівалентні в звичайному сенсі, де g_* — відображення, індуковане перетворенням g на множині векторних полів.

Розглянемо тепер лінійне диференціальне рівняння r -го порядку \mathcal{L} вигляду

$$L[u] := \sum_{|\alpha| \leq r} a^\alpha(x) u_\alpha = 0$$

з невідомою функцією u незалежних змінних $x = (x_1, \dots, x_n)$, де коефіцієнт a^α з $|\alpha| = r$ є ненульовим.

Серед ліівських симетрій лінійних диференціальних рівнянь особливу роль відіграють симетрії, асоційовані з лінійними диференціальними операторами першого порядку, що діють на $u = u(x)$. Якщо $n \geq 2$ і $r \geq 2$ або $n = 1$ і $r \geq 3$, то із системи визначальних рівнянь $\text{SDE}(\mathcal{L})$ на коефіцієнти векторних полів з максимальної алгебри інваріантності \mathfrak{g}^{\max} рівняння \mathcal{L} випливає, що $\xi_u^i = 0$ і $\eta_{uu} = 0$. Іншими словами, кожне таке векторне поле можна зобразити у вигляді

$$Q = \xi^i(x)\partial_i + (\eta^1(x)u + \eta^0(x))\partial_u, \quad (2)$$

причому із системи $\text{SDE}(\mathcal{L})$ додатково випливає, що η^0 є довільним розв'язком рівняння \mathcal{L} . Векторні поля $\eta^0(x)\partial_u$, де η^0 пробігає множину розв'язків рівняння \mathcal{L} , утворюють ідеал алгебри \mathfrak{g}^{\max} і генерують точкові перетворення, що асоційовані з лінійним принципом суперпозиції. Якщо хоча б один з коефіцієнтів ξ^i або η^1 є ненульовим, з точністю до еквівалентності в \mathfrak{g}^{\max} , породженої приєднаними діями елементів із ідеалу, можна покласти в (2) $\eta^0 = 0$.

Метою подальшого розгляду є розширення останнього твердження на оператори редукції вигляду (2), які будемо називати *лінійними операторами редукції*. Варто зауважити, що загальні умови, при яких лінійне диференціальне рівняння допускає лише оператори редукції, еквівалентні лінійним, на сьогодні невідомі.

Додатково слід нагадати, що векторне поле Q називають (*слабо*) *сингулярним* для диференціального рівняння $\mathcal{L}: L[u] = 0$, якщо існує диференційовна функція $\tilde{L} = \tilde{L}[u]$ порядку менше r і ненульова диференційовна функція $\lambda = \lambda[u]$ порядку не вище r такі, що $L|_{\mathcal{Q}(r)} = \lambda\tilde{L}|_{\mathcal{Q}(r)}$. Інакше Q є (*слабо*) *регулярним* векторним полем для \mathcal{L} . Векторне поле Q *ультрасингулярне* для рівняння \mathcal{L} , якщо це рівняння задовольняє будь-який розв'язок характеристичного рівняння $Q[u] := \eta - \xi^i u_i = 0$. Властивості сингулярних операторів редукції описані в [5, 7].

Теорема 1. *Нехай лінійне диференціальне рівняння \mathcal{L} допускає оператор редукції Q вигляду (2). Тоді коефіцієнт η^0 допускає зображення $\eta^0 = \xi^i \zeta_i^0 - \eta^1 \zeta^0$, де $\zeta^0 = \zeta^0(x)$ — розв'язок рівняння \mathcal{L} . Отже, з точністю до еквівалентності, породженої дією групи ліівських симетрій рівняння \mathcal{L} на множині операторів редукції цього рівняння, коефіцієнт η^0 можна покласти рівним нулю. Будь-яке векторне поле вигляду $\xi^i \partial_i + (\eta^1 u + \xi^i \zeta_i - \eta^1 \zeta) \partial_u$, де $\zeta = \zeta(x)$ — довільний розв'язок рівняння \mathcal{L} , є оператором редукції рівняння \mathcal{L} .*

Доведення. Оскільки Q є оператором редукції, то хоча б один із коефіцієнтів ξ^i не є нульовим. Розглянемо векторне поле $\hat{Q} = \xi^i(x)\partial_i + \eta^1(x)u\partial_u$. Нехай $X^1(x), \dots, X^{n-1}(x)$ — функціонально незалежні розв'язки рівняння $\xi^i v_i = 0$, і нехай $U(x)$ ненульовий розв'язок рівняння $\xi^i v_i + \eta^1 v = 0$. Введемо позначення $X = (X^1, \dots, X^n)$, тоді компоненти X та функція $U(x)u$ будуть функціонально незалежними як функції змінних (x, u) . Це означає, що заміна змінних $\mathcal{T}: \tilde{x} = X(x), \tilde{u} = U(x)u$ добре визначена.

Виконаємо цю заміну змінних і подамо всі об'єкти і співвідношення в нових змінних (\tilde{x}, \tilde{u}) . Так, векторне поле \hat{Q} збігається з генератором зсувів відносно змінної \tilde{x}_n , $\hat{Q} = \partial_{\tilde{x}_n}$, і тому $Q = \partial_{\tilde{x}_n} + \tilde{\eta}^0(\tilde{x})\partial_{\tilde{u}}$, де $\tilde{\eta}^0(\tilde{x}) = U(x)\eta^0(x)$, а характеристичне рівняння асоційоване з векторним полем Q у нових змінних має вигляд $\tilde{u}_{\tilde{x}_n} = \tilde{\eta}^0$. Заміна змінних \mathcal{T} також зберігає лінійність рівняння \mathcal{L} , яке набуває вигляду

$$\tilde{L}[\tilde{u}] = \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^\alpha(\tilde{x})\tilde{u}_\alpha = 0, \quad (3)$$

де кожен з коефіцієнтів \tilde{a}^α виражається через коефіцієнти $a^{\alpha'}$, $|\alpha'| \geq |\alpha|$ та похідні функцій X^i і U . Змінна \tilde{u}_α у просторі струменів J^r відповідає похідній $\partial^{|\alpha|}\tilde{u}/\partial\tilde{x}_1^{\alpha_1} \dots \partial\tilde{x}_n^{\alpha_n}$. З точ-

ністю до ненульового множника, коефіцієнт \tilde{a}^{α^0} , де $|\alpha^0| = r$, можна зробити тотожно рівним 1.

Позначимо первісну функції $\tilde{\eta}^0$ за змінною \tilde{x}_n через $\tilde{\zeta}^0$: $\tilde{\eta}^0 = \tilde{\zeta}_{\tilde{x}_n}^0$. Розглянемо окремо два випадки в залежності від того, чи є оператор редукції Q ультрасингулярним для рівняння \mathcal{L} , і покажемо, що в кожному з цих випадків існує первісна $\tilde{\zeta}^0$ функції $\tilde{\eta}^0$, яка задовольняє зображення (3) рівняння \mathcal{L} у нових змінних, тобто $\tilde{L}[\tilde{\zeta}^0] = 0$.

Припустимо, що оператор редукції Q є ультрасингулярним для рівняння \mathcal{L} . Оскільки властивість ультрасингулярності не залежить від заміни змінних, кожен розв'язок характеристичного рівняння $\tilde{u}_{\tilde{x}_n} = \tilde{\eta}^0$ задовольняє зображення $\tilde{L}[\tilde{u}] = 0$ рівняння \mathcal{L} у нових змінних, тобто

$$\sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha - \delta_n}^0 + \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n = 0} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{u}_{\alpha} = 0,$$

де похідні \tilde{u}_{α} з $\alpha_n = 0$ не зв'язані. Розщеплюючи за ними, одержуємо систему рівнянь $\tilde{a}^{\alpha} = 0$, де α пробігає множину мультиіндексів з $|\alpha| \leq r$ і $\alpha_n = 0$, і рівняння на коефіцієнт $\tilde{\eta}^0$:

$$\sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha - \delta_n}^0 := \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha}^0 = 0.$$

Отже, підсумовування у рівнянні (3) насправді йде лише за мультиіндексами α , в яких $\alpha_n \neq 0$, а тому функція $\tilde{\zeta}^0$ задовольняє це рівняння.

Припустимо тепер, що оператор редукції Q не є ультрасингулярним для рівняння \mathcal{L} . Оскільки r -те продовження Q визначають як $Q_{(r)} = \partial_{\tilde{x}_n} + \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{\eta}_{\alpha}^0(\tilde{x}) \partial_{\tilde{u}_{\alpha}}$, то в цьому випадку

з критерію умовної інваріантності отримуємо

$$Q_{(r)} \tilde{L}[\tilde{u}] = \sum_{|\alpha| \leq r} (\tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{u}_{\alpha} + \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha}^0) = 0 \quad (4)$$

для всіх точок простору струменів J^r , де $\tilde{L}[\tilde{u}] = 0$ і $\tilde{u}_{\alpha'} = \tilde{\eta}_{\alpha' - \delta_n}^0$ з $|\alpha'| \leq r$ і $\alpha_n > 0$. Оскільки $\tilde{a}^{\alpha^0} = 1$, диференційовна функція $Q_{(r)} \tilde{L}[\tilde{u}]$ не залежить від похідної \tilde{u}_{α^0} , а тому умова $\tilde{L}[\tilde{u}] = 0$ не є суттєвою при переході на многовид $\mathcal{L} \cap \mathcal{Q}_{(r)}$. Враховуючи, що похідні \tilde{u}_{α} з $\alpha_n = 0$ не є зв'язаними, розщеплення умови (4) за ними дає систему рівнянь $\tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} = 0$, де α пробігає множину мультиіндексів з $|\alpha| \leq r$ і $\alpha_n = 0$, як необхідну умову того, що рівняння \mathcal{L} допускає оператор редукції Q . Тоді на многовиді $\mathcal{Q}_{(r)}$ маємо

$$\begin{aligned} Q_{(r)} \tilde{L}[\tilde{u}] &= \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n = 0} \tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{u}_{\alpha} + \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{u}_{\alpha} + \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha}^0 = \\ &= \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha - \delta_n}^0 + \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\eta}_{\alpha}^0 = \\ &= \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n = 0} \tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha}^0 + \sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n \neq 0} \tilde{a}_{\tilde{x}_n}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha}^0 + \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha + \delta_n}^0 = \left(\sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha}^0 \right)_{\tilde{x}_n} = 0. \end{aligned}$$

Проінтегрувавши останню рівність за змінною \tilde{x}_n , отримуємо, що функція $\tilde{\zeta}^0 = \tilde{\zeta}^0(x)$ задовольняє неоднорідне лінійне рівняння

$$\tilde{L}[\tilde{\zeta}^0] := \sum_{|\alpha| \leq r} \tilde{a}^{\alpha} \tilde{\zeta}_{\alpha}^0 = g(x_1, \dots, x_{n-1}) \quad (5)$$

для деякої гладкої функції $g = g(x_1, \dots, x_{n-1})$. Оскільки в цьому випадку оператор редукції Q не є ультрасингулярним для рівняння \mathcal{L} , то існує мультиіндекс α з $|\alpha| \leq r$ і $\alpha_n = 0$ такий, що $\tilde{a}^\alpha \neq 0$. Тоді рівняння (5) має частковий розв'язок h , який не залежить від змінної \tilde{x}_n , тобто $h = h(x_1, \dots, x_{n-1})^1$. Функція $\tilde{\zeta}^0 - h$ також є первісною для $\tilde{\eta}^0$ за змінною \tilde{x}_n і одночасно задовольняє відповідне однорідне лінійне рівняння, тобто $\tilde{L}[\tilde{\zeta}^0 - h] = 0$. Таким чином, без обмеження загальності можна вважати, що первісна $\tilde{\zeta}^0$ сама є розв'язком рівняння (3), тобто $\tilde{L}[\tilde{\zeta}^0] = 0$.

Виконавши обернену заміну змінних у рівності $\tilde{\eta}^0 = \tilde{\zeta}_{\tilde{x}_n}^0 = \hat{Q}\tilde{\zeta}^0$ і ввівши у розгляд функцію $\zeta^0 = \tilde{\zeta}^0/U$, яка задовольняє рівняння \mathcal{L} у старих змінних (x, u) , отримаємо $U\eta^0 = \xi^i(U\zeta^0)_i = U\xi^i\zeta_i^0 + (\xi^i U_i)\zeta^0 = U(\xi^i\zeta_i^0 - \eta^1\zeta^0)$, тобто $\eta^0 = \xi^i\zeta_i^0 - \eta^1\zeta^0$. Тут враховано, що $\xi^i U_i = -\eta^1 U$. Відображення, породжене точковим перетворенням симетрії $\bar{x} = x$, $\bar{u} = u - \zeta^0(x)$ рівняння \mathcal{L} на множині операторів редукції рівняння \mathcal{L} , переводить векторне поле Q у векторне поле \hat{Q} , в якому коефіцієнт η^0 є нульовим. Це означає, що \hat{Q} є оператором редукції рівняння \mathcal{L} . Застосовуючи аналогічне відображення, породжене перетворенням точкової симетрії $\bar{x} = x$, $\bar{u} = u + \zeta(x)$ з довільним розв'язком $\zeta = \zeta(x)$ рівняння \mathcal{L} , отримуємо, що будь-яке векторне поле вигляду $\xi^i\partial_i + (\eta^1 u + \xi^i\zeta_i - \eta^1\zeta)\partial_u$ є оператором редукції рівняння \mathcal{L} . Теорему доведено.

Анзац, побудований для невідомої функції u за векторним полем Q , має вигляд

$$u = \frac{1}{U(x)}\varphi(\omega_1, \dots, \omega_{n-1}) + \zeta^0(x),$$

де φ — інваріантна залежна змінна, $\omega_1 = X^1(x)$, \dots , $\omega_{n-1} = X^{n-1}(x)$ — інваріантні незалежні змінні, і приводить до такого редукованого рівняння:

$$\sum_{|\alpha| \leq r, \alpha_n = 0} \tilde{a}^\alpha(\omega_1, \dots, \omega_{n-1}) \frac{\partial^{|\alpha|} \varphi}{\partial \omega_1^{\alpha_1} \dots \partial \omega_{n-1}^{\alpha_{n-1}}} = 0.$$

Очевидно, що вигляд редукованого рівняння не залежить від параметр-функції $\zeta^0(x)$, тобто підстановка будь-якого розв'язку рівняння \mathcal{L} замість $\zeta^0(x)$ приводить до того ж редукованого рівняння.

2. Сингулярні оператори редукції рівняння стрижня. Для лінійного рівняння стрижня (1) оператори редукції мають загальний вигляд

$$Q = \tau(t, x, u)\partial_t + \xi(t, x, u)\partial_x + \eta(t, x, u)\partial_u,$$

де коефіцієнти τ , ξ й η — гладкі функції змінних (t, x, u) , причому $(\tau, \xi) \neq (0, 0)$. Аналогічно еволюційним рівнянням, векторне поле Q сингулярне для рівняння (1) тоді і лише тоді, коли коефіцієнт τ тотожно рівний нулю. Зауважимо, що векторні поля, слабо сингулярні для цього рівняння, також є сильно сингулярними для нього. Тоді $\xi \neq 0$, а тому, зважаючи на звичайну еквівалентність операторів редукції, можемо покласти $\xi = 1$. Іншими словами, для вичерпного опису сингулярних операторів редукції лінійного рівняння стрижня (1) достатньо розглянути векторні поля вигляду

$$Q = \partial_x + \eta(t, x, u)\partial_u.$$

¹Якщо $n > 2$, то для гарантованого існування класичних розв'язків необхідно припускати, що всі функції є аналітичними. У випадку $n = 2$ або для конкретних лінійних рівнянь можна вимагати меншу гладкість функцій.

Многовид $\mathcal{L} \cap \mathcal{Q}_{(4)}$ визначається рівняннями $u_x = \eta$, $u_{xx} = \eta_x + \eta\eta_u$, $u_{xxx} = (\partial_x + \eta\partial_u)^2\eta$, $u_{xxxx} = (\partial_x + \eta\partial_u)^3\eta$, $u_{tt} = -u_{xxxx} = -(\partial_x + \eta\partial_u)^3\eta$. З критерію умовної інваріантності випливає, що $\eta_{tt} + 2\eta_{tu}u_t + \eta_{uu}u_t^2 - \eta_u(\partial_x + \eta\partial_u)^3\eta + (\partial_x + \eta\partial_u)^4\eta = 0$. Збираючи коефіцієнти при різних степенях незв'язної похідної u_t і розщеплюючи відносно них, отримуємо систему трьох визначальних рівнянь для коефіцієнта η :

$$\eta_{uu} = 0, \quad \eta_{tu} = 0, \quad \eta_{tt} - \eta_u(\partial_x + \eta\partial_u)^3\eta + (\partial_x + \eta\partial_u)^4\eta = 0.$$

Таким чином, на відміну від (1 ± 1) -вимірних еволюційних рівнянь, для кожного з яких є лише одне визначальне рівняння на коефіцієнт η сингулярних операторів редукції, еквівалентне у певному сенсі вихідному еволюційному рівнянню, знаходження операторів редукції для лінійного рівняння стрижня не є “no-go” проблемою. З рівнянь $\eta_{uu} = 0$ і $\eta_{tu} = 0$ для коефіцієнта η маємо $\eta = \eta^1(x)u + \eta^0(t, x)$, де $\eta^1 = \eta^1(x)$ і $\eta^0 = \eta^0(t, x)$ — гладкі функції відповідних змінних. Згідно з теоремою 1, з точністю до еквівалентності, що породжується максимальною лівською групою симетрії G^{\max} лінійного рівняння стрижня на множині операторів редукції цього рівняння, можна покласти $\eta^0 = 0$.

Покажемо це також за допомогою прямих обрахунків. Після підстановки виразу для η в останнє визначальне рівняння і додаткового розщеплення за степенями u отримуємо систему $\partial_x(\partial_x + \eta^1)^3\eta^1 = 0$, $\eta_{tt}^0 - \eta^1\eta^{03} + \eta^{04} = 0$, де функції η^{03} і η^{04} визначаються рекурентним співвідношенням $\eta^{00} := \eta^0$ і $\eta^{0k} = \eta_x^{0,k-1} + \eta^0(\partial_x + \eta^1)^{k-1}\eta^1$, $k = 1, 2, 3, 4$. Виконаємо диференціальну підстановку

$$\eta^1 = \frac{\theta_x}{\theta}, \quad \eta^0 = \zeta_x - \frac{\theta_x}{\theta}\zeta,$$

де $\theta = \theta(x)$ і $\zeta = \zeta(t, x)$ — нові невідомі функції. Індукцією можна довести, що

$$\eta^{0k} = \frac{\partial^{k+1}\zeta}{\partial x^{k+1}} - \frac{\zeta}{\theta} \frac{d^{k+1}\theta}{dx^{k+1}}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Отже, диференціальна підстановка редукує систему для η^1 і η^0 до системи для θ і ζ :

$$\left(\frac{\theta_{xxxx}}{\theta}\right)_x = 0, \quad \zeta_{tt} - \frac{\theta_x}{\theta}\zeta_{tt} - \frac{\theta_x}{\theta}\zeta_{xxxx} + \frac{\theta_x\theta_{xxxx}}{\theta^2}\zeta + \zeta_{xxxx} - \frac{\theta_{xxxx}}{\theta}\zeta = 0.$$

Інтегруючи один раз перше рівняння, отримуємо лінійне звичайне диференціальне рівняння зі сталими коефіцієнтами $\theta_{xxxx} = \kappa\theta$, де κ — стала інтегрування. Друге рівняння можна записати як

$$\left(\frac{\zeta_{tt} + \zeta_{xxxx}}{\theta}\right)_x - \left(\frac{\theta_{xxxx}}{\theta}\right)_x \zeta = 0, \quad \text{звідки} \quad \left(\frac{\zeta_{tt} + \zeta_{xxxx}}{\theta}\right)_x = 0.$$

Інтегруючи останнє рівняння за x , отримуємо рівняння $\zeta_{tt} + \zeta_{xxxx} = \rho(t)\theta$, де ρ — гладка функція змінної t . Функцію ζ визначено з точністю до перетворень $\tilde{\zeta} = \zeta + \sigma\theta$, де σ — довільна гладка функція змінної t . Справді, $\tilde{\zeta}_{tt} + \tilde{\zeta}_{xxxx} = \rho\theta + \sigma_{tt}\theta + \sigma\kappa\theta = 0$, якщо $\sigma_{tt} + \kappa\sigma = -\rho$. Іншими словами, можна вважати, що функція ζ задовольняє лінійне рівняння стрижня (1). Тому відображення, що породжується точковим перетворенням симетрії $\bar{t} = t$, $\bar{x} = x$, $\bar{u} = u - \zeta(t, x)$ рівняння (1) на множині операторів редукції цього рівняння, переводить векторне поле Q у векторне поле такого самого вигляду, де $\zeta = 0$, і звідси $\eta^0 = 0$.

Твердження 1. З точністю до еквівалентності за перетвореннями симетрії, пов'язаними з лінійним принципом суперпозиції, множину сингулярних операторів редукції лінійного рівняння стрижня вичерпують векторні поля вигляду $Q_s = \partial_x + \frac{\theta_x}{\theta} u \partial_u$, де функція $\theta = \theta(t, x)$ задовольняє звичайне диференціальне рівняння $\theta_{xxxx} = \kappa \theta$ для деякої сталої κ .

Анзац, побудований за оператором редукції Q , має вигляд $u = \theta(x)\varphi(\omega)$, де $\omega = t$ — інваріантна незалежна змінна, φ — інваріантна залежна змінна, і дає редуковане рівняння $\varphi_{\omega\omega} + \kappa\varphi = 0$. Відзначимо, що оператор редукції Q_s пов'язаний з розділенням змінних у лінійному рівнянні стрижня (1). Він еквівалентний деякому оператору лівської симетрії лише за умови $\theta_x/\theta = \text{const}$.

3. Регулярні оператори редукції рівняння стрижня. Для таких операторів коефіцієнт τ не є нульовим. З точністю до звичайної еквівалентності операторів редукції можна покласти $\tau = 1$, тобто

$$Q = \partial_t + \xi(t, x, u)\partial_x + \eta(t, x, u)\partial_u.$$

Суттєвими серед рівнянь, що визначаються многовидом $\mathcal{L} \cap \mathcal{Q}_{(4)}$, є рівняння

$$u_t = \eta - \xi u_x, \quad u_{tx} = \eta_x + \eta u_x - \xi_x u_x - \xi_u u_x^2 - \xi u_{xx},$$

$$u_{tt} = -u_{xxxx} = \eta_t + \eta_u(\eta - \xi u_x) - (\xi_t + \xi_u(\eta - \xi u_x))u_x - \xi(\eta_x + \eta u_x - \xi_x u_x - \xi_u u_x^2 - \xi u_{xx}).$$

Збираючи коефіцієнти при $u_{xx}u_{xxx}$ в умові, що впливає з критерію умовної інваріантності, отримуємо рівняння $\xi_u = 0$. Інші члени з u_{xxx} дають рівняння $\eta_{uu} = 0$ і $\eta_{xu} = 3\xi_{xx}/2$. Таким чином, маємо $\xi = \xi(t, x)$, $\eta = \eta^1(t, x)u + \eta^0(t, x)$, де $\eta^1 := \frac{3}{2}\xi_x + \gamma(t)$ і $\gamma = \gamma(t)$ — гладка функція. Інші визначальні рівняння зводяться до вигляду

$$2\xi_t\xi + 5\xi_{xxx} + 4\xi^2\xi_x = 0, \tag{6}$$

$$\xi_{tt} + \xi_{xxxx} + 2(\eta^1\xi)_t + 2\xi_t\xi_x - 4\eta_{xxx}^1 + 8\xi\xi_x\eta^1 - 4\xi\xi_x^2 = 0, \tag{7}$$

$$\eta_{tt}^1 + \eta_{xxxx}^1 + 2\eta^1\eta_t^1 - 2\xi_t\eta_x^1 + 4\xi_x(\eta_t^1 + \eta^1\eta^1 - \xi\eta_x^1) = 0, \tag{8}$$

$$\eta_{tt}^0 + \eta_{xxxx}^0 + 2\eta^0\eta_t^1 - 2\xi_t\eta_x^0 + 4\xi_x(\eta_t^0 + \eta^1\eta^0 - \xi\eta_x^0) = 0, \tag{9}$$

де всі η^1 слід замінити на $3\xi_x/2 + \gamma(t)$.

Аналогічно сингулярним операторам редукції, з теореми 1 знову маємо, що з точністю до еквівалентності, породженої максимальною групою лівських симетрій G^{\max} лінійного рівняння стрижня на множині операторів редукції цього рівняння, можна покласти $\eta^0 = 0$.

Покажемо, що пряме доведення цього факту не є тривіальним. Дійсно, нехай функція ζ визначається співвідношенням $\eta^0 = \zeta_t + \xi\zeta_x - \eta^1\zeta$. Виконавши підстановку цього співвідношення для η^0 у рівняння (9) та врахувавши рівняння (6)–(8) і $\eta_{xu} = 3\xi_{xx}/2$, отримуємо таке рівняння для функції ζ :

$$(\partial_t + \xi\partial_x - \eta^1 + 4\xi_x)(\zeta_{tt} + \zeta_{xxxx}) = 0,$$

тобто $\zeta_{tt} + \zeta_{xxxx} = h(t, x)$, де функція $h = h(t, x)$ задовольняє рівняння

$$h_t + \xi h_x + (-\eta^1 + 4\xi_x)h = 0.$$

Функцію $h = h(t, x)$ можна вважати рівною нулю. Дійсно, функція ζ визначається з точністю до доданка, що є розв'язком рівняння $g_t + \xi g_x - \eta^1 g = 0$. Кожен такий розв'язок можна зобразити $g = g^0(t, x)\varphi(\omega)$, де g^0 — фіксований розв'язок цього ж рівняння, φ — довільна функція від ω , і $\omega = \omega(t, x)$ — несталий розв'язок рівняння $\omega_t + \xi\omega_x = 0$. Тоді $\chi = \omega_x^4$ задовольняє рівняння $\chi_t + \xi\chi_x + 4\xi_x\chi = 0$. Таким чином, функція h допускає зображення $h = g^0\omega_x^4\psi(\omega)$ з деякою гладкою функцією ψ від ω . Вищезгадані визначальні рівняння означають, що векторне поле $\partial_t + \xi\partial_x + \eta^1 u\partial_u$ є оператором редукції рівняння $u_{tt} + u_{xxxx} = 0$. Звідси маємо $g_{tt} + g_{xxxx} = g^0\omega_x^4\varphi_{\omega\omega\omega\omega} + \dots = g^0\omega_x^4(\varphi_{\omega\omega\omega\omega} + \dots)$, де вираз у дужках залежить лише від ω і через (\dots) позначено члени, що містять похідні від φ лише порядку менше, ніж чотири. Це означає, що анзац $g = g^0(t, x)\varphi(\omega)$ редукує рівняння $g_{tt} + g_{xxxx} = h$ до звичайного диференціального рівняння $\varphi_{\omega\omega\omega\omega} + \dots = \psi$, яке безперечно має деякий розв'язок $\varphi^0 = \varphi^0(\omega)$. Віднімаючи відповідну функцію $g = g^0\varphi^0$ від функції ζ , занулимо функцію h .

Таким чином, без обмеження загальності можна вважати, що функція ζ задовольняє початкове рівняння (1). Тоді відображення, породжене точковим перетворенням симетрії $\bar{t} = t$, $\bar{x} = x$, $\bar{u} = u - \zeta(t, x)$ рівняння (1) на множині операторів редукції цього рівняння, переводить векторне поле Q у векторне поле того ж вигляду, де $\zeta = 0$, а тому $\eta^0 = 0$.

Отже, вивчення регулярних операторів редукції лінійного рівняння стрижня (1) зведено до розв'язання перевизначеної системи нелінійних диференціальних рівнянь (6)–(8) для функцій $\xi = \xi(t, x)$ і $\gamma = \gamma(t)$. (Нагадаємо, що $\eta^1 := 3\xi_x/2 + \gamma(t)$.) Побудова загального розв'язку цієї системи виявилася непередбачувано складною задачею. Тому нижче розглянуто лише часткові випадки регулярних операторів редукції, що виникають при накладенні додаткових обмежень на функції ξ і γ . Зокрема, складні і громіздкі обчислення в Maple показали, що кожен регулярний оператор редукції рівняння (1) з $\gamma = 0$ еквівалентний оператору лівської симетрії цього рівняння. Аналогічний результат справедливий і при сукупності обмежень $\xi_{xx} = 0$ і $\xi \neq 0$. Регулярних операторів редукції, для яких $\xi_t = 0$ і $\xi_x \neq 0$, взагалі немає.

Припустимо, що $\xi = 0$. Тоді рівняння (6) і (7) стають тотожностями і коефіцієнт η^1 допускає зображення $\eta^1 = \gamma(t)$. З рівняння (8) отримуємо єдине звичайне диференціальне рівняння $\gamma_{tt} + 2\gamma\gamma_t = 0$ для функції γ , проінтегрувавши яке один раз, знаходимо $\gamma_t + \gamma^2 = -\kappa$, де κ — стала інтегрування. Звідси $\gamma = \varphi_t/\varphi$, де $\varphi = \varphi(t)$ — розв'язок лінійного звичайного диференціального рівняння $\varphi_{tt} + \kappa\varphi = 0$. Відповідний оператор редукції $Q_t = \partial_t + \frac{\varphi_t}{\varphi}u\partial_u$ дає анзац $u = \varphi(t)\theta(\omega)$, де $\omega = x$ — інваріантна незалежна змінна і θ — інваріантна залежна змінна. Відповідне редуковане рівняння має вигляд $\theta_{\omega\omega\omega\omega} = \kappa\theta$, тобто, як і для сингулярного оператора редукції Q_s з твердження 1, регулярний оператор редукції Q_t пов'язаний з розділенням змінних у лінійному рівнянні стрижня (1). Цей оператор можна розглядати як регулярний відповідник оператора Q_s . Регулярний оператор Q_t еквівалентний деякому оператору лівської симетрії лише за умови $\varphi_t/\varphi = \text{const}$.

Основним результатом роботи є теорема 1 про лінійні оператори редукції загального лінійного диференціального рівняння з частинними похідними. Як приклад, що ілюструє теорему, досліджено неklasичні симетрії лінійного рівняння стрижня. Наступним кроком є узагальнення отриманих результатів на багатовимірні модулі редукції, породжені лінійними векторними полями.

Дослідження підтримано Австрійським науковим фондом (FWF), проект P25064.

1. *Morozov O. I., Wafo Soh C.* The equivalence problem for the Euler–Bernoulli beam equation via Cartan’s method // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2008. – **41**. – 135206, 14 p.
2. *Ndogmo J. C.* Equivalence transformations of the Euler–Bernoulli equation // *Nonlinear Anal. Real World Appl.* – 2012. – **13**. – P. 2172–2177.
3. *Wafo Soh C.* Euler–Bernoulli beams from a symmetry standpoint – characterization of equivalent equations // *J. Math. Anal. Appl.* – 2008. – **345**. – P. 387–395.
4. *Polyanin A. D.* Handbook of linear partial differential equations for engineers and scientists. – Boca Raton: Chapman & Hall/CRC, 2002. – 781 p.
5. *Boyko V. M., Kunzinger M., Popovych R. O.* Singular reduction modules of differential equations. – arXiv: 1201.3223, 30 p.
6. *Fushchych W. I., Tsyfra I. M.* On a reduction and solutions of the nonlinear wave equations with broken symmetry // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 1987. – **20**. – L45–L48.
7. *Kunzinger M., Popovych R. O.* Singular reduction operators in two dimensions // *J. Phys. A: Math. Theor.* – 2008. – **41**. – 505201, 24 p.
8. *Popovych R. O., Vaneeva O. O., Ivanova N. M.* Potential nonclassical symmetries and solutions of fast diffusion equation // *Phys. Lett. A.* – 2007. – **362**. – P. 166–173.
9. *Zhdanov R. Z., Tsyfra I. M., Popovych R. O.* A precise definition of reduction of partial differential equations // *J. Math. Anal. Appl.* – 1999. – **238**. – P. 101–123.
10. *Олвер П.* Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям. – Москва: Мир, 1989. – 639 с.

*Інститут математики НАН України, Київ
Інститут Вольфганга Паулі, Відень, Австрія*

Надійшло до редакції 07.03.2013

В. Н. Бойко, Р. Е. Попович

Условные симметрии линейного уравнения стержня

Изучены условные симметрии (1+1)-мерного линейного уравнения стержня, что иллюстрирует новую теорему о линейных операторах редукции линейных дифференциальных уравнений в частных производных.

V. M. Boyko, R. O. Popovych

Conditional symmetries of the linear rod equation

Conditional symmetries of the (1+1)-dimensional linear rod equation are studied, which illustrates a new theorem on linear reduction operators of linear partial differential equations.

Д. В. Болотов

Топология плоских слоений коразмерности один

*(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. А. Борисенко)**Описана топологическая структура замкнутых ориентируемых многообразий, допускающих плоские трансверсально ориентируемые слоения коразмерности один.*

Будем называть слоение \mathcal{F} на римановом многообразии M *плоским*, если все слои \mathcal{F} в индуцируемой метрике имеют нулевую секционную кривизну. Если секционная кривизна (кривизна Риччи) слоев неотрицательна, то \mathcal{F} есть *слоение неотрицательной кривизны* (*неотрицательной кривизны Риччи*). Многообразие и слоение предполагаются минимум C^2 -гладкими. В [1] автором были классифицированы все замкнутые трехмерные ориентируемые многообразия, допускающие трансверсально ориентируемые слоения неотрицательной кривизны. Мы покажем, что трансверсально ориентируемое слоение неотрицательной кривизны на ориентируемом трехмерном многообразии плоское тогда и только тогда, когда многообразие является торическим расслоением или полурасслоением (теорема 4). Затем мы частично обобщим этот результат на многомерный случай (теорема 5).

Используя результаты [2] о структуре слоения в окрестности компактного слоя с абелевой голономией, автор доказал [3], что трансверсально ориентируемое слоение коразмерности один неотрицательной кривизны Риччи на замкнутом ориентируемом многообразии является слоением почти без голономии. Это означает, что нетривиальной голономией могут обладать только компактные слои. Вместе с глубокими результатами С. П. Новикова [4] и Х. Иманиши [5] это позволило доказать следующую теорему, для формулировки которой напомним некоторые определения.

Насыщенным множеством слоеного многообразия M называется подмножество M , являющееся объединением слоев.

Подмножество $B \subset M$ многообразия M со слоением \mathcal{F} коразмерности один назовем *блоком*, если B — насыщенное множество, являющееся многообразием с краем.

Блок B называется *собственным*, если все внутренние слои B некомпактны, диффеоморфны типичному слою L , и каждый слой $L \subset B$ является вложенным подмногообразием в B .

Блок B называется *плотным*, если все внутренние слои B диффеоморфны типичному слою L и всюду плотны в B .

Назовем блок B *исключительным*, если он гомеоморфен $K \times I$, где K является компактным слоем слоения, и слой $K \times 0$ является предельным для множества компактных слоев в B .

Теорема 1 [3]. *Пусть \mathcal{F} — трансверсально ориентируемое слоение коразмерности один неотрицательной кривизны Риччи на замкнутом ориентируемом римановом многообразии M . Тогда \mathcal{F} является слоением почти без голономии и выполнена одна из следующих возможностей:*

1. Все слои всюду плотны и M является расслоением над S^1 .
 2. F содержит компактный слой и M можно разбить конечным числом компактных слоев на блоки одного из следующих типов:

- A) исключительный блок;
- B) плотный блок;
- C) собственный блок.

Для B или C имеем:

$$\widetilde{\text{int}} B \simeq \tilde{L} \times \mathbb{R}, \quad (1)$$

где L — типичный внутренний слой блока B . При этом фундаментальная группа B описывается групповым расширением

$$1 \rightarrow \pi_1(L) \rightarrow \pi_1(B) \xrightarrow{\phi} \mathbb{Z}^k \rightarrow 0. \quad (2)$$

Более того, $k \geq 1$ и $k = 1$ тогда и только тогда, когда блок собственный.

3. Если \mathcal{F} — слоение неотрицательной секционной кривизны, то граница каждого блока имеет максимум две компоненты связности.

Говорят, что многообразие имеет кокомпактную группу изометрий, если оно содержит компактное подмножество, образ которого под действием группы изометрий замечает все многообразие. Нам понадобится следующий результат.

Теорема 2 [6]. Пусть (M, \mathcal{F}) — слоеное полное риманово многообразие. Предположим, что существует изометрическое накрытие $p: \hat{L} \rightarrow L$ слоя $L \xrightarrow{i} M$, имеющее кокомпактную группу изометрий. Если $L' \subset \bar{L}$, то существует последовательность изометрий $g_i: \hat{L} \rightarrow \hat{L}$ такая, что последовательность отображений $i \circ p \circ g_i: \hat{L} \rightarrow M$ сходится равномерно на компактных множествах к отображению $f: \hat{L} \rightarrow M$, чей образ является слоем L' , а индуцированное отображение на образ $p': \hat{L} \rightarrow L'$ является изометрическим накрытием.

Плоские слоения на трехмерных многообразиях. В [1] автору удалось классифицировать все ориентируемые замкнутые многообразия, допускающие трансверсально ориентируемые слоения неотрицательной кривизны. Для формулировки результата приведем некоторые определения.

Скрученным I -расслоением над бутылкой Клейна называется единственное, с точностью до послыного гомеоморфизма, ориентируемое многообразие с краем, гомеоморфное тотальному пространству расслоения над бутылкой Клейна со слоем отрезок.

Торическое полурасслоение — это многообразие, полученное склейкой по общей границе двух скрученных I -расслоений над бутылкой Клейна.

Призматическое пространство — это сферическая форма, двулистно накрываемая линзовым пространством, допускающая ровно две различные структуры расслоения Зейферта.

Теорема 3 [1]. Пусть M^3 — гладкое замкнутое ориентируемое риманово многообразие размерности 3, а \mathcal{F} — трансверсально ориентируемое слоение неотрицательной кривизны коразмерности 1 на этом многообразии. Тогда M^3 гомеоморфно многообразию одного из следующих типов:

- 1) торическое расслоение над окружностью;
- 2) торическое полурасслоение;
- 3) $S^2 \times S^1$;

4) $\mathbb{R}P^3 \# \mathbb{R}P^3$;

5) линзовое пространство $L_{p/q}$;

6) призматическое пространство.

Каждое из перечисленных многообразий для некоторой метрики допускает слоение неотрицательной кривизны.

Отметим, что пространство, стоящее под нечетным номером, двулистно покрывает пространство, стоящее под следующим четным номером.

Этот результат можно уточнить следующим утверждением.

Теорема 4. *Трансверсально ориентируемое слоение \mathcal{F} коразмерности один неотрицательной кривизны на замкнутом ориентируемом трехмерном многообразии M плоское тогда и только тогда, когда M есть торическое расслоение или полурасслоение.*

Доказательство. Пусть \mathcal{F} — плоское слоение на M . Тогда M асферично (см. [7, 8]). В теореме 3 асферическим многообразиям отвечают только случаи 1 и 2, поэтому M есть торическое расслоение или полурасслоение.

Теперь предположим, что слоение неотрицательной кривизны обладает слоем L , который не является плоским. Если L компактен, то из ориентируемости слоения¹ следует, что он гомеоморфен S^2 . Тогда, по теореме стабильности Рибба, M есть S^2 -расслоение над S^1 , следовательно, M не асферично. Если L некомпактен, то он гомеоморфен \mathbb{R}^2 и $\int_{\mathbb{R}^2} K ds < \infty$ (см. [9]). Это означает, что на бесконечности кривизна K стремится к нулю, так как K является ограничением непрерывной функции, заданной на компактном многообразии, и поэтому является равномерно непрерывной на L . Покажем, что L не может принадлежать плотному блоку. В этом случае к любой точке $x \in L$ сходится последовательность точек $x_k \in L$ (в M), принадлежащая некоторому трансверсальному отрезку, проходящему через x . Поэтому последовательность $\{x_k\}$ является замкнутым изолированным подмножеством в L , так как все точки принадлежат разным локальным слоям расслоенной координатной окрестности U_x . Отсюда следует, что $x_k \rightarrow \infty$, а $K(x_k) \rightarrow 0$. По непрерывности получаем, что $K(x) = 0$. А так как точка x взята произвольно, $K \equiv 0$. Следовательно, L — собственный слой, принадлежащий собственному блоку B (см. [1]). В этом случае, по теореме 1, B является расслоением над S^1 со слоем L . Так как L гомеоморфен \mathbb{R}^2 , блок B гомотопически эквивалентен окружности. Из [4] следует, что B есть риббовская компонента. В [1] доказывается, что если \mathcal{F} имеет риббовскую компоненту, то M получено склейкой либо двух полноториев, либо полнотория и скрученного I -расслоения над бутылкой Клейна. В любом случае мы получим одно из многообразий 3–6, не являющееся асферическим. Осталось заметить, что торические расслоения и полурасслоения допускают плоские слоения [1]. Теорема доказана.

Плоские слоения на многообразиях большей размерности. Следующей теоремой мы обобщим некоторые свойства плоских слоений на случай большей размерности.

Теорема 5. *Пусть \mathcal{F} — плоское трансверсально ориентируемое слоение коразмерности один на замкнутом ориентируемом многообразии. Тогда выполнена одна из следующих возможностей.*

1. \mathcal{F} не содержит компактные слои. Тогда \mathcal{F} является слоением без голономии со всюду плотными слоями, изометричными риманову произведению $S \times E^k$, а само многообразие гомеоморфно расслоению над S^1 .

¹ \mathcal{F} ориентируемо, так как M ориентируемо, а \mathcal{F} трансверсально ориентируемо.

2. \mathcal{F} содержит компактные слои. Если $\dim M \geq 5$, то все компактные слои гомеоморфны между собой, а само многообразие или его двулистное накрытие гомеоморфно расслоению над окружностью со слоем, гомеоморфным компактному слою слоения.

Доказательство. Докажем п. 1 теоремы. Из теоремы 1 следует, что \mathcal{F} есть слоение без голономии со всюду плотными слоями. В [4] доказывалось, что все слои диффеоморфны типичному слою L и $\widetilde{M} \cong \widetilde{L} \times \mathbb{R}$. В этом случае имеется действие $\rho: \pi_1(M) \rightarrow \text{Diff}(\mathbb{R})$ фундаментальной группы $\pi_1(M)$ на \mathbb{R} , причем ядро этого действия совпадает с фундаментальной группой типичного слоя. В [6] доказывалось, что почти все слои слоения неотрицательной кривизны со всюду плотными слоями являются римановым произведением души S (компактного вполне геодезического и вполне выпуклого подмногообразия) на евклидов фактор E^k . Пусть $L \xrightarrow{i} M$ такой слой. Заметим, что подгруппа параллельных переносов в $\text{Iso}(L)$ кокомпактна в $\text{Iso}(L)$. Так как L всюду плотен, то, по теореме 2, существует последовательность параллельных переносов $f_i: L \rightarrow L$ такая, что последовательность отображений $i \circ f_i: L \rightarrow M$ сходится равномерно на компактных множествах к отображению $f: L \rightarrow M$, чей образ является наперед заданным слоем L' , а $f: L \rightarrow L'$ является изометрическим накрытием.

Всякий замкнутый путь $\phi: S^1 \rightarrow L$ свободно гомотопен любому замкнутому пути $f_k \circ \phi$. Последовательность путей $\{f_k \circ \phi\}$ сходится к замкнутому пути $f \circ \phi$, свободно гомотопному $f_k \circ \phi$ в M для больших k , так как для больших k отображение f_k близко к f . Поэтому существует гомотопия F_t , соединяющая замкнутые пути ϕ и $f \circ \phi$. Вспомним, что любое накрытие, в частности f , индуцирует мономорфизм $f_*: \pi_1(L, y_0) \rightarrow \pi_1(L', f(y_0))$ фундаментальных групп. Покажем, что на самом деле f_* — изоморфизм. Рассмотрим коммутативную диаграмму, индуцируемую включениями $i^L: L \rightarrow M$, $i^{L'}: L' \rightarrow M$ и накрытием $f: L \rightarrow L'$:

$$\begin{array}{ccc} \pi_1(M, f(y_0)) & \xleftarrow{i_*^{L'}} & \pi_1(L', f(y_0)) \\ \psi_\alpha i_*^L \uparrow & \nearrow f_* & \\ \pi_1(L, y_0) & & \end{array}$$

где $\alpha: I \rightarrow M$ обозначает путь $F_t(y_0)$, а $\psi_\alpha: \pi_1(M, y_0) \rightarrow \pi_1(M, f(y_0))$ — изоморфизм фундаментальных групп, соответствующий пути α , который соединяет отмеченные точки y_0 и $f(y_0)$. Но $i_*^{L'}(\pi_1(L', f(y_0))) = \psi_\alpha i_*^L(\pi_1(L, y_0)) \cong \text{Ker } \rho$. Поэтому f_* — изоморфизм, а $f: L \rightarrow L'$ — изометрический диффеоморфизм.

Докажем п. 2. Отметим, что для слоений коразмерности один неположительной кривизны, в частности для плоских слоений, гомоморфизм $i_*: \pi_1(L) \rightarrow \pi_1(M)$, индуцированный включением, инъективен для любого слоя L . Более того, оказывается, что \widetilde{M} гомеоморфно \mathbb{R}^n , а слои поднятого слоения $\widetilde{\mathcal{F}}$ гомеоморфны \mathbb{R}^{n-1} [7].

Из (1) следует, что всякий блок B имеет гомотопический тип $K(\pi, 1)$ -пространства. Пусть $K \in \partial B$. Тогда имеем $\text{cd } \pi_1(K) = n - 1$ и $\text{cd } \pi_1(B) \geq \text{cd } \pi_1(K)$, так как $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$ — мономорфизм, индуцированный вложением $i: K \rightarrow B$ (здесь $\text{cd } G$ обозначает когомологическую размерность группы G). Отсюда $\text{cd } \pi_1(B) = n - 1$, так как B является многообразием с краем, поэтому стягивается на $n - 1$ -остов.

Напомним, что PD -группой G называется группа с двойственностью Пуанкаре. На геометрическом языке это означает, что $K(G, 1)$ пространство гомотопически эквивалентно конечному CW — комплексу, чьи гомологии и когомологии удовлетворяют изоморфизму

двойственности Пуанкаре. В частности G есть PD -группа, если G есть фундаментальная группа замкнутого многообразия.

Из работы [10] следует, что $\pi_1(B)$ является PD -группой, так как является расширением PD -группы посредством PD -группы (см. (2)) (заметим, что слой гомотопически эквивалентен своей душе [11]). Теорема Штребеля [12] гласит, что подгруппа Γ' бесконечного индекса PD -группы Γ имеет $\text{cd } \Gamma' < \text{cd } \Gamma$. Отсюда следует, что образ $i_*(\pi_1(K))$ является коконечной подгруппой в $\pi_1(B)$. На самом деле индекс $i_*(\pi_1(K))$ в $\pi_1(B)$ не превосходит двух, так как если он больше двух, то можно показать, что существует конечнолистное накрытие B с плоским поднятым слоением, являющееся блоком с более чем двумя компонентами связности границы, что противоречит п. 3 теоремы 1. Если i_* — изоморфизм фундаментальных групп, то $i: K \rightarrow B$ — гомотопическая эквивалентность. Поэтому число связных компонент ∂B равно двум, иначе мы имели бы $i_*(H_{n-1}(K)) = 0$ в $H_{n-1}(B)$ при том, что гомотопическая эквивалентность должна индуцировать изоморфизм групп гомологий, а из ориентируемости слоения следует, что $H_{n-1}(K) \neq 0$. Если число связных компонент ∂B равно двум, то $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$ — эпиморфизм, так как в противном случае, как и выше, блок B имел бы конечнолистное накрытие с большим, чем два числом компонент связности границы. Но $i_*: \pi_1(K) \rightarrow \pi_1(B)$ — мономорфизм, как отмечалось в начале доказательства п. 2 теоремы, поэтому вложение $i: K \rightarrow B$ является гомотопической эквивалентностью. Мы заключаем, что индекс $i_*(\pi_1(K))$ в $\pi_1(B)$ равен двум тогда и только тогда, когда ∂B имеет одну компоненту связности. В этом случае B имеет двулистное накрытие с двумя компонентами связности границы, вложение каждой из которых в блок является гомотопической эквивалентностью.

Ф. Т. Фаррел и В. К. Хсианг доказали, что группа Уайтхеда $Wh(\pi_1(K)) = 0$ для любого замкнутого плоского риманова многообразия K [13]. Поэтому если B — блок с двумя компонентами связности границы, то по теореме об s -кобордизме $B \cong K \times I$ (см. [14], если $\dim K \geq 5$, и [15], если $\dim K = 4$). Отсюда при условии, что все блоки имеют две компоненты связности границы, M гомеоморфно расслоению над S^1 со слоем K . В случае, если имеется блок с одной компонентой связности границы, M можно представить в виде объединения двух блоков A и B , пересекающихся по компактному слою K . Из вышесказанного следует, что $\pi_1(M) = \pi_1(A) *_{\pi_1(K)} \pi_1(B)$. В этом случае существует двулистное накрытие $\bar{M} \rightarrow M$, соответствующее подгруппе $\pi' \in \pi_1(M)$ индекса два, такое, что A и B поднимаются в \bar{M} в блоки \bar{A} и \bar{B} , имеющие две общие компоненты связности границы, каждая из которых гомеоморфна K . Поэтому все блоки в двулистном накрытии \bar{M} гомеоморфны $K \times I$ и \bar{M} является расслоением над S^1 , что и требовалось доказать.

Автор выражает благодарность проф. А. А. Борисенко за внимание к работе.

1. Болотов Д. В. Слоения неотрицательной кривизны на замкнутых трехмерных многообразиях // *Мат. сб.* — 2009. — **200**. — С. 3–16.
2. Nishimori T. Compact leaves with abelian holonomy // *Tohoku Math. J.* — 1975. — **27**. — P. 259–272.
3. Болотов Д. В. О структуре слоений коразмерности один неотрицательной кривизны // *Тр. конф. “Актуальные проблемы современной математики, механики и информатики”, ХНУ им. В. Н. Каразина.* — Харьков: Апостроф, 2011. — С. 324–331.
4. Новиков С. П. Топология слоений // *Тр. Моск. мат. о-ва.* — 1965. — **14**. — С. 249–278.
5. Imanishi H. Structure of codimension one foliations which are almost without holonomy // *J. Math. Kyoto Univ.* — 1976. — **313**, No 1. — P. 93–99.
6. Adams S., Stuck G. Splitting of non-negatively curved leaves in minimal sets of foliations // *Duke Math. J.* — 1993. — **71**. — P. 71–92.

7. *Stuck G.* Un analogue feuilleté du theoreme de Cartan–Hadamard // C. r. Acad. Sci. Paris. – 1991. – **313**. – P. 519–522.
8. *Болотов Д. В.* Об универсально равномерно стягиваемых слоениях коразмерности // Доп. НАН України. – 2010. – № 9. – С. 7–9.
9. *Kon-Fossen S.* Kürzeste Wege und Totalkrümmung auf Flächen // Compos. Math. – 1935. – **2**. – P. 69–133.
10. *Bieri R.* Gruppen mit Poincaré-Dualität // Comment. Math. Helv. – 1972. – **47**. – P. 373–396.
11. *Cheeger G., Gromoll D.* On structure of complete manifolds of nonnegative curvature // Ann. Math. – 1972. – **96**. – P. 413–443.
12. *Strebel R.* A remark on subgroups of finite index in Poincaré duality groups // Comment. Math. Helv. – 1977. – **52**. – P. 317–324.
13. *Farrell F. T., Hsiang W. C.* The topological-Euclidean space form problem // Invent. Math. – 1978. – **45**. – P. 181–192.
14. *Милнор Дж.* Теорема об h -кобордизме. – Москва: Мир, 1969. – 114 с.
15. *Freedman M., Teichner P.* Teichner 4-manifold topology // Invent. Math. – 1995. – **122**, No 3. – P. 509–529.

Фізико-технічний інститут низьких температур
НАН України ім. Б. І. Веркина, Харків

Поступило в редакцію 04.02.2013

Д. В. Болотов

Топологія плоских шарувань ковимірності один

Описано топологічну структуру замкнених орієнтованих многовидів, що допускають плоскі трансверсально орієнтовні шарування ковимірності один.

D. V. Bolotov

Topology of flat codimension one foliations

We describe the topological structure of closed oriented manifolds admitting flat transversally oriented codimension one foliations.

Зображення груп лінійних операторів у банаховому просторі степеневими рядами

Для довільної C_0 -групи та аналітичної C_0 -півгрупи лінійних операторів у банаховому просторі встановлюється існування щільної у цьому просторі множини, на елементах якої задану групу або півгрупу можна зобразити у вигляді степеневого ряду для експоненти від її генератора. Даються умови, за яких цей степеневий ряд є цілою оператор-функцією експоненціального типу.

Нехай $\{U(t)\}_{t \geq 0}$ — C_0 -півгрупа лінійних операторів у банаховому просторі \mathfrak{B} з нормою $\|\cdot\|$ над полем \mathbb{C} комплексних чисел, тобто:

- (i) $\forall t, s \in \mathbb{R}_+ = [0, \infty): U(t+s) = U(t)U(s)$;
- (ii) $U(0) = I$ (I — одиничний оператор в \mathfrak{B});
- (iii) $\forall x \in \mathfrak{B}: U(t)x \rightarrow x$ при $t \rightarrow 0$.

Якщо сім'я лінійних операторів $U(t)$ в \mathfrak{B} , задана на всій дійсній осі \mathbb{R} , задовольняє умови (i)–(iii) на \mathbb{R} , то $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ визначає C_0 -групу.

Позначимо через A генератор півгрупи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ (групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$):

$$Ax = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)x - x}{t}, \quad \mathcal{D}(A) = \left\{ x \in \mathfrak{B} \mid \exists \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)x - x}{t} \right\}$$

($\mathcal{D}(\cdot)$ — область визначення оператора).

Як відомо, оператор A замкнений і $\overline{\mathcal{D}(A)} = \mathfrak{B}$. Він є неперервним тоді і тільки тоді, коли $U(t) \rightarrow I$ ($t \rightarrow 0$) в рівномірній операторній топології. У цьому випадку

$$\forall x \in \mathfrak{B}: U(t)x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k A^k x}{k!} \tag{1}$$

і $U(t)$ допускає продовження до цілої \mathfrak{B} -значної функції експоненціального типу.

Якщо ж оператор A не є неперервним, то постають такі питання:

1. Чи існує щільний в \mathfrak{B} підпростір \mathfrak{B}_1 такий, що рівність (1) здійснюється для кожного $x \in \mathfrak{B}_1$?

2. Чи знайдеться в \mathfrak{B} підпростір \mathfrak{B}_0 , щільний в \mathfrak{B} і такий, що для будь-якого $x \in \mathfrak{B}_0$ вектор-функція $U(t)x$ є цілою експоненціального типу?

Перше питання тісно пов'язане з проблемою розв'язності задачі Коші для рівняння $y'(t) = Ay(t)$ у різних класах аналітичних вектор-функцій, а друге — з можливістю наближеного розв'язання цієї задачі методом степеневих рядів. Нижче ці проблеми розглядаються у випадках, коли A є генератором C_0 -групи або аналітичної C_0 -півгрупи лінійних операторів в \mathfrak{B} .

1. Нехай A — довільний замкнений, щільно заданий в \mathfrak{B} лінійний оператор. Множину таких операторів позначимо через $E(\mathfrak{B})$, а через $L(\mathfrak{B})$ — множину всіх обмежених на \mathfrak{B}

лінійних операторів. Вектор $x \in C^\infty(A) = \bigcap_{n=1}^{\infty} \mathcal{D}(A^n)$ називається цілим для оператора A , якщо ряд у правій частині (1) збігається в \mathbb{C} . Очевидно, що $x \in C^\infty(A)$ є цілим вектором оператора $A \in E(\mathfrak{B})$ тоді і тільки тоді, коли

$$\forall \alpha > 0 \quad \exists c = c(x) > 0: \quad \|A^n x\| \leq c \alpha^n n^n \quad (\forall n \in \mathbb{N}_0 = \{0\} \cup \mathbb{N})$$

(скрізь у подальшому під c розумітимемо сталу, відповідну до розглядуваної ситуації). Для оператора $A \in L(\mathfrak{B})$ будь-який вектор $x \in \mathfrak{B}$ є цілим. Що ж до необмежених операторів, то серед них є такі, для яких жоден вектор, відмінний від нульового, не є цілим.

Будемо говорити, що цілий вектор x оператора $A \in E(\mathfrak{B})$ має скінченний порядок, якщо існує число $\gamma \in (-\infty, 1)$ таке, що, починаючи з деякого номера $n_0 = n_0(x)$,

$$\forall n \geq n_0: \quad \|A^n x\| \leq n^{n\gamma}.$$

Точну нижню межу $p(x)$ таких γ назвемо порядком вектора x . Тип $s(x)$ вектора x порядку $p(x)$ визначається як

$$s(x) = \inf\{\alpha > 0: \|A^n x\| \leq \alpha^n n^{p(x)} \ (n \geq n_0)\}.$$

Вважатимемо, що цілий вектор x оператора A порядку $p(x)$ має мінімальний тип, якщо $s(x) = 0$, нормальний — за умови, що $0 < s(x) < \infty$, і максимальний — при $s(x) = \infty$.

Для числа β покладемо

$$\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A) = \bigcup_{\alpha > 0} \mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A) \quad \text{при} \quad 0 \leq \beta < 1;$$

$$\mathfrak{G}_{(\beta)}(A) = \bigcap_{\alpha > 0} \mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A) \quad \text{при} \quad 0 < \beta \leq 1,$$

де

$$\mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A) = \{x \in C^\infty(A) \mid \exists c = c(x) > 0: \|A^n x\| \leq c \alpha^n n^{n\beta} \ (n \in \mathbb{N}_0)\} —$$

банахів простір відносно норми

$$\|x\|_{\mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A)} = \sup_{n \in \mathbb{N}_0} \frac{\|A^n x\|}{\alpha^n n^{n\beta}}.$$

Якщо x — цілий вектор оператора A порядку p і скінченного типу, то $x \in \mathfrak{G}_{\{p\}}(A)$. Елементи простору $\mathfrak{G}_{\{0\}}(A)$ називаються цілими векторами експоненціального типу оператора A .

У просторах $\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$ і $\mathfrak{G}_{(\beta)}(A)$ вводиться топологія індуктивної та, відповідно, проєктивної границі просторів $\mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A)$ (див [1, 2]):

$$\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A) = \text{ind} \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A), \quad \mathfrak{G}_{(\beta)}(A) = \text{proj} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A).$$

Зауважимо, що простір $\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$ є регулярною індуктивною границею, а тому послідовність $x_n \in \mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$ збігається до x у цьому просторі тоді і тільки тоді, коли існує $\alpha > 0$ таке, що $x_n \in \mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A)$ і $x_n \rightarrow x$ ($n \rightarrow \infty$) у цьому банаховому просторі. Збіжність у просторі $\mathfrak{G}_{(\beta)}(A)$ рівносильна збіжності в $\mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A)$ для довільного $\alpha > 0$.

\mathfrak{B} -значна вектор-функція $f(\lambda)$ називається цілою в $\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$ ($\mathfrak{G}_{(\beta)}(A)$), якщо вона є цілою у банаховому просторі $\mathfrak{G}_{\beta}^{\alpha}(A)$ з деяким (будь-яким) α . Для оператора $A \in L(\mathfrak{B})$ маємо $\mathfrak{G}_{\{0\}}(A) = \mathfrak{B}$.

У конкретному випадку, коли $\mathfrak{B} = C([a, b])$, $-\infty < a < b < \infty$, а

$$Ax(t) = x'(t), \quad \mathcal{D}(A) = C^1([a, b]),$$

$C^{\infty}(A)$ є не що інше, як множина всіх нескінченно диференційовних на $[a, b]$ функцій, $\mathfrak{G}_{(1)}(A)$ ($\mathfrak{G}_{\{0\}}(A)$) — простір усіх неперервних на $[a, b]$ функцій, що допускають продовження до цілих (цілих експоненціального типу) функцій.

2. У даному вище прикладі простір $\mathfrak{G}_{\{0\}}(A)$ є щільним в $C([a, b])$. Але це, взагалі кажучи, не так у випадку довільного замкненого A . Неважко навести приклад оператора $A \in E(\mathfrak{B})$, для якого $\mathfrak{G}_{(1)}(A) = \{0\}$. Проте якщо A — генератор C_0 -групи, то має місце таке твердження.

Теорема 1. Нехай A — генератор C_0 -групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ в \mathfrak{B} . Тоді

$$\forall \beta \in (0, 1) : \overline{\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)} = \overline{\mathfrak{G}_{(\beta)}(A)} = \mathfrak{B}.$$

За умови, що спектр $\sigma(A)$ оператора A є дійсним і мажоранта його резольвенти $M(\delta) = \sup_{|\operatorname{Im} \lambda| \geq \delta > 0} \|R_{\lambda}(A)\|$ задовольняє умову Левінсона

$$\int_0^1 \ln \ln M(\delta) d\delta < \infty, \quad (2)$$

маємо $\overline{\mathfrak{G}_{\{0\}}(A)} = \mathfrak{B}$.

Будемо називати генератор A C_0 -групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ неквазіаналітичним, якщо

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln \|U(t)\|}{1+t^2} dt < \infty. \quad (3)$$

Як показано в [3], спектр неквазіаналітичного A лежить на дійсній осі, а для його резольвенти виконується нерівність (2). Відмітимо також, що умова (3) є близькою до необхідної. Це підтверджує такий приклад.

Приклад 1. Нехай $\mathfrak{B} = L_2(\mathbb{R}, \tau^2(t)dt)$, де вимірна локально обмежена функція $\tau(t) \geq 1$, $t \in \mathbb{R}$, задовольняє умови: 1) $\forall t, s \in \mathbb{R} : \tau(t+s) \leq \tau(t) \cdot \tau(s)$; 2) $\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln \tau(t)}{1+t^2} dt = \infty$. Тоді оператор

$$(Ax)(t) = -x'(t),$$

$$\mathcal{D}(A) = \{x(t) \in C(\mathbb{R}) \mid x(t) \text{ абсолютно неперервна і } x(t), x'(t) \in L_2(\mathbb{R}, \tau^2(t)dt)\},$$

породжує C_0 -групу $(U(t)x)(s) = x(s-t)$, для якої $\|U(t)\| \leq \tau(t)$. Покажемо, що для будь-якого $\alpha > 0$ $\mathfrak{G}_0^{\alpha}(A) = \{0\}$.

Припустимо, що це не так. Тоді існують $\alpha > 0$ та $0 \neq x(t) \in L_2(\mathbb{R}, \tau^2(t)dt)$ такі, що $x \in \mathfrak{G}_0^{\alpha}(A)$, тобто

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x^{(n)}(t)|^2 dt \leq \int_{-\infty}^{\infty} |x^{(n)}(t)|^2 \tau^{2n}(t) dt < (c\alpha^n)^2 \quad (n \in \mathbb{N}_0),$$

а отже, $x(t) \in L_2(\mathbb{R})$ допускає продовження до цілої функції експоненціального типу. З нерівності $2 \ln_+ |x(t)| < |x(t)|^2$ випливає, що

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln_+ |x(t)|}{1+t^2} dt < \infty,$$

звідки (див. [4, с. 315])

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\ln |x(t)||}{1+t^2} dt < \infty.$$

Покладемо тепер $y(t) = \tau(t)x(t)$. Оскільки

$$|y(t)|^2 = \exp\left(\frac{2(1+t^2)}{1+t^2} \ln |y(t)|\right) > \frac{2(1+t^2)}{1+t^2} \ln |y(t)| \geq \frac{\ln |y(t)|}{1+t^2} = \frac{\ln |x(t)|}{1+t^2} + \frac{\ln |\tau(t)|}{1+t^2},$$

то $\int_{-\infty}^{\infty} |y(t)|^2 dt = \infty$, що суперечить включенню $x(t) \in L_2(\mathbb{R}, \tau^2(t)dt)$.

Нагадаємо, що ціла вектор-функція $f(\lambda)$ має скінченний порядок росту, якщо для достатньо великих $|\lambda|$ виконується нерівність $\|f(\lambda)\| \leq \exp(|\lambda|^\gamma)$ з деяким $\gamma > 0$. Точна нижня межа $\rho = \rho(f)$ таких γ називається порядком $f(\lambda)$. Під типом вектор-функції $f(\lambda)$ порядку ρ розуміється число

$$\sigma(f) = \inf\{a > 0: \|f(\lambda)\| \leq \exp(a|\lambda|^\rho)\}.$$

Якщо $\sigma(f) = 0$, то тип $f(\lambda)$ вважається мінімальним, а при $0 < \sigma(f) < \infty$ — нормальним. Якщо ж $\rho(f) \leq 1$, то $f(\lambda)$ називається цілою вектор-функцією експоненціального типу.

Як зазначалося вище, у випадку, коли генератор A C_0 -групи (C_0 -півгрупи) $U(t)$, $t \in \mathbb{R}$ ($t \in \mathbb{R}_+$) обмежений, вектор-функція $U(t)x$ є цілою експоненціального типу для довільного $x \in \mathfrak{B}$. Це, взагалі кажучи, не так, якщо A не є обмеженим. Але для C_0 -груп має місце

Теорема 2. *Нехай $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ — C_0 -група лінійних операторів в \mathfrak{B} з генератором A . Для того щоб $U(t)x$ допускала продовження до цілої вектор-функції в \mathfrak{B} , необхідно і достатньо, щоб $x \in \mathfrak{G}_{(1)}(A)$. Вектор-функція $U(t)x$ є цілою скінченного порядку ρ і нормального (мінімального) типу σ тоді і тільки тоді, коли вектор x є цілим для оператора A порядку ρ і нормального (мінімального) типу s , пов'язаних з ρ і σ співвідношеннями*

$$\rho = \frac{1}{1-p}, \quad \sigma = \frac{(se)^\rho}{\rho e}.$$

Більш того, якщо $x \in \mathfrak{G}_{(\beta)}(A)$ з $\beta \in (0, 1]$ ($\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$ з $\beta \in [0, 1)$), то ряд у правій частині (1) збігається у просторі $\mathfrak{G}_{(\beta)}(A)$ ($\mathfrak{G}_{\{\beta\}}(A)$) в усій комплексній площині і визначає цілу вектор-функцію у цьому просторі.

З теорем 1, 2 випливає, що для C_0 -групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ з генератором A у просторі \mathfrak{B} зазначена вище проблема, асоційована з питанням 1, завжди має розв'язок, а $\mathfrak{B}_1 = \mathfrak{G}_{(1)}(A)$ — максимальний простір, на якому ця проблема є розв'язною, тобто, якщо ряд у правій частині (1) збігається для довільного $t \in \mathbb{R}_+$, то $x \in \mathfrak{G}_{(1)}(A)$ і його сума дорівнює $U(t)x$ для всіх $t \in \mathbb{C}$. Що стосується питання 2, то, як показує приклад 1, проблема, пов'язана з ним,

не завжди є розв'язною — існують C_0 -групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$, для яких вектор-функція $U(t)x$ є цілою експоненціального типу лише при $x = 0$. Але якщо $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ задовольняє умову (3), то є така множина $\mathfrak{B}_0: \overline{\mathfrak{B}_0} = \mathbb{B}$, а саме $\mathfrak{B}_0 = \mathfrak{G}_{\{0\}}(A)$, на елементах x якої $U(t)x$ допускає продовження до цілої вектор-функції експоненціального типу.

3. Припустимо тепер, що A — генератор C_0 -півгрупи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$. Незважно навести приклад, коли множина тих $x \in \mathcal{D}(A)$, на якій ряд в (1) збігається до $U(t)x$ на \mathbb{R}_+ , складається лише з нуля. Проте якщо $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ є аналітичною, відповідь на питання 1 є позитивною.

Нагадаємо (див. [5]), що C_0 -півгрупа $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ називається аналітичною з кутом $\theta \in (0, \pi/2]$, якщо оператор-функція $U(t)$ визначена в секторі $S_\theta = \{z \in \mathbb{C} : |\arg z| < \theta\}$, є аналітичною в цьому секторі і має там такі властивості:

- 1) $\forall z_1, z_2 \in S_\theta: U(z_1 + z_2) = U(z_1)U(z_2)$;
- 2) $\forall x \in \mathfrak{B}: U(z)x$ є аналітичною в S_θ ;
- 3) $\forall x \in \mathfrak{B}: \|U(z)x - x\| \rightarrow 0$ при $z \rightarrow 0$ у будь-якому замкненому підсекторі з S_θ .

Аналітична з кутом θ півгрупа $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ називається обмеженою, якщо оператор-функція $U(z)$ є обмеженою в кожному секторі S_φ з $\varphi < \theta$.

Теорема 3. *Нехай $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ — обмежена аналітична C_0 -півгрупа з кутом $\theta \leq \pi/2$ у банаховому просторі \mathfrak{B} і A — її генератор. Тоді $\overline{\mathfrak{G}_{(\gamma)}(A)} = \mathfrak{B}$ для довільного $\gamma > 1 - 2\theta/\pi$. У випадку, коли $\theta = \pi/2$, існують обмежені аналітичні з кутом $\theta = \pi/2$ C_0 -півгрупи, для яких $\mathfrak{G}_{\{0\}}(A) = \{0\}$. Але за умови (2) маємо $\overline{\mathfrak{G}_{\{0\}}(A)} = \mathfrak{B}$.*

Ця теорема дає змогу сформулювати відповіді на поставлені вище запитання 1, 2 для аналітичних півгруп.

Теорема 4. *Нехай $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}_+}$ — обмежена аналітична C_0 -півгрупа з кутом $\theta \leq \pi/2$ у банаховому просторі \mathfrak{B} і A — її генератор. Тоді відповідь на запитання 1 є позитивною, а саме $\mathfrak{B}_1 = \mathfrak{G}_{(1)}(A)$, і цей простір є максимальним, на якому ряд у правій частині (1) збігається при $t \in \mathbb{R}$. Якщо $\theta = \pi/2$ і виконується умова (2), тоді розв'язною є і проблема, пов'язана з питанням 2. У цьому випадку $\mathfrak{B}_0 = \mathfrak{G}_{\{0\}}(A)$.*

Варто зазначити, що умова (2), що фігурує у цій теоремі, є близькою до необхідної в тому розумінні, що існують аналітичні півгрупи з кутом $\theta = \pi/2$, для яких $\mathfrak{B}_0 = \{0\}$.

4. Зупинимося коротко на історичних аспектах розглянутих вище проблем.

Виходячи з формули Тейлора, Ж. Л. Лагранж (див. [6]) у 1772 р. записав формулу

$$x(t+s) = \exp\left(t \frac{d}{ds}\right) x(s) = \sum_0^\infty \frac{t^n x^{(n)}(s)}{n!}, \quad (4)$$

в якій, як бачимо, група зсувів $U(t)x(s) = x(t+s)$ зображується у вигляді експоненти від її генератора — оператора диференціювання. І хоча формула (4) не була обґрунтована, він використовував її з великою майстерністю. Ця формула привела його до низки нових теорем, доведення яких важко собі уявити без її існування. Для осмислення ж цього результату у випадку довільного лінійного оператора A , тобто усвідомлення того, а що ж саме треба розуміти під e^{tA} , знадобилось майже два століття — і це стало одним із найважливіших досягнень математичного аналізу середини ХХ ст. Так, у випадку, коли A — лінійний оператор у просторі $\mathfrak{B} = \mathbb{C}$, тобто $Ax = ax$, $a \in \mathbb{C}$, Л. Ейлер [7] (1728 р.) дав два визначення експоненти:

$$e^{ta} = \sum_0^\infty \frac{(ta)^n}{n!} \quad \text{та} \quad e^{ta} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{at}{n}\right)^n.$$

У 1821 р. А. Л. Коші [8] дав означення $U(t) = e^{ta}$ як розв'язок функціонального рівняння

$$U(t+s) = U(t)U(s), \quad (5)$$

а точніше, встановив, що якщо $U(t)$ — неперервний розв'язок рівняння (5), то існує єдине $a \in \mathbb{C}$ таке, що $U(t) = e^{ta}$. У подальшому цей факт був поширений на випадок довільних операторів з $L(\mathfrak{B})$ і оператор-функції $U(t)$, неперервної в рівномірній операторній топології (див., наприклад, [5]). Що стосується C_0 -груп і C_0 -півгруп з необмеженим генератором, а саме вони найчастіше зустрічаються в задачах математичної фізики (прикладом є група зсувів у формулі Лагранжа), то М. Стоуном [9] (1932 р.) на основі операційного числення для самоспряжених операторів було встановлено, що сім'я $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ унітарних операторів у гільбертовому просторі \mathfrak{H} утворює C_0 -групу тоді і тільки тоді, коли існує самоспряжений оператор A в \mathfrak{H} такий, що

$$\forall t \in \mathbb{R}: U(t) = e^{itA} = \int_{-\infty}^{\infty} e^{it\lambda} dE_\lambda$$

(E_λ — розклад одиниці оператора A). Оскільки для самоспряженого оператора A простори

$$\mathfrak{G}_{\{0\}}(A) = \{E_\Delta x: x \in \mathfrak{H}, \Delta — компакт в \mathbb{R}\} \quad \text{та}$$

$$\mathfrak{G}_{(1)}(A) = \left\{ x \in \mathfrak{H} \mid \forall \alpha > 0: \int_{-\infty}^{\infty} e^{\alpha\lambda} d(E_\lambda x, x) < \infty \right\}$$

є щільними в \mathfrak{H} , то, беручи до уваги теореми 3, 4, робимо висновок, що для довільної C_0 -групи унітарних операторів в \mathfrak{H} проблеми, асоційовані з питаннями 1, 2, вирішуються позитивно.

У зв'язку зі сказаним вище А. М. Колмогоров поставив задачу: довести для будь-якої C_0 -групи $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ лінійних операторів у банаховому просторі \mathfrak{B} існування щільної в \mathfrak{B} множини \mathfrak{B}_1 , на елементах якої ця група зображується рядом (1). У випадку, коли $\{U(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$ є обмеженою, ця проблема була розв'язана І. М. Гельфандом [10]. Варто зазначити, що сформульована у п. 2 теорема 2 не тільки розв'язує поставлену задачу для довільної C_0 -групи, але й описує максимальну множину \mathfrak{B}_1 , на елементах якої ряд (1) збігається до $U(t)$ при $t \in \mathbb{R}$.

Робота виконана за підтримки спільного українсько-російського проекту НАН України і Російського фонду фундаментальних досліджень (проект № 01/01-12).

1. Канторович Л. В., Акилов Г. П. Функциональный анализ в нормированных пространствах. — Москва: Физматгиз, 1959. — 684 с.
2. Gorbachuk V. I., Gorbachuk M. L. Boundary value problems for operator differential equations. — Dordrecht: Kluwer, 1991. — 347 p.
3. Любич Ю. И., Мацаев В. И. Об операторах с отделимым спектром // Мат. сб. — 1962. — **56**, № 4. — С. 433–468.
4. Левин Б. Я. Распределение корней целых функций. — Москва: Гостехтеоретиздат, 1956. — 632 с.
5. Хилле Э., Филлипс Р. С. Функциональный анализ и полугруппы. — Москва: Изд-во иностр. лит., 1962. — 830 с.
6. Lagrange J. L. Nouvelle espèce de calcul // Nouveaux Mémoires de l'Académie Rouale des Sciences et Belles-Lettres. — 1772. — **3**. — P. 185–218.

7. *Euler L.* Nova methodus innumerabiles aequationes differentiales secundi gradus reducendi ad aequationes differentiales primi gradus // Commentarii Academiae Scientiarum Petropolitanae. – 1728. – **3**. – P. 124–137.
8. *Cauchy A. L.* Cours d'Analyse de l'Ecole Royale Polytechnique, première Partie Analyse Algébrique. – Paris, 1821. – 576 p.
9. *Stone M. H.* On one-parameter unitary groups in Hilbert space // Ann. Math. – 1932. – **33**. – P. 643–648.
10. *Гельфанд И. М.* Об однопараметрических группах операторов в нормированном пространстве // Докл. АН СССР. – 1939. – **25**, № 9. – С. 713–718.

Інститут математики НАН України, Київ
НТУ України “Київський політехнічний інститут”

Надійшло до редакції 29.03.2013

Член-корреспондент НАН України **М. Л. Горбачук, В. М. Горбачук**

Представление групп линейных операторов в банаховом пространстве степенными рядами

Для произвольной C_0 -группы и аналитической C_0 -полугруппы линейных операторов в банаховом пространстве устанавливается существование плотного в этом пространстве множества, на элементах которого заданную группу или полугруппу можно представить в виде степенного ряда для экспоненты от ее генератора. Приводятся условия, при которых этот степенной ряд является целой оператор-функцией экспоненциального типа.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. L. Gorbachuk, V. M. Gorbachuk**

Representation of groups of linear operators on a Banach space by means of power series

For an arbitrary C_0 -group, as well as an arbitrary analytic C_0 -semigroup of linear operators on a Banach space, the existence of a dense set in this space, on elements of which the given group or semigroup may be represented in the form of a power series for the exponential function of its infinitesimal generator, is established. The conditions are found, under which this power series determines an entire operator-function of exponential type.

О. Ю. Дашкова

Модули над групповыми кольцами обобщенно разрешимых групп

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины В. П. Моторным)

Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль такой, что \mathbf{R} — коммутативное кольцо, $A/C_A(G)$ не является нетеровым \mathbf{R} -модулем (соответственно $A/C_A(G)$ не является артиновым \mathbf{R} -модулем, $A/C_A(G)$ не является минимаксным \mathbf{R} -модулем), $C_G(A) = 1$, G — гипер(локально разрешимая) группа. Описаны свойства гипер(локально разрешимой) группы G такой, что любая собственная подгруппа H группы G , для которой $A/C_A(H)$ не является нетеровым \mathbf{R} -модулем (соответственно $A/C_A(H)$ не является артиновым \mathbf{R} -модулем, $A/C_A(H)$ не является минимаксным \mathbf{R} -модулем), конечно порождена.

Пусть F — поле, A — векторное пространство над полем F , $GL(F, A)$ — группа всех F -автоморфизмов векторного пространства A . Группа $GL(F, A)$ и ее подгруппы называются линейными группами. Линейные группы являются одним из старейших объектов исследования алгебры. Конечномерные линейные группы изучены достаточно хорошо. В случае, когда размерность $\dim_F A$ векторного пространства A над полем F бесконечна, ситуация кардинально другая. Бесконечномерные линейные группы исследовались мало. Это направление исследования является достаточно новым и требует решения ряда важных вопросов. Вместе с тем бесконечномерные линейные группы играют важную роль в различных областях математики и ее приложениях. Исследование бесконечномерных линейных групп возможно лишь при наложении дополнительных ограничений на рассматриваемые группы. Примером таких ограничений являются различные условия конечности. Одним из важных условий конечности является финитарность линейной группы. Напомним, что группа G называется финитарной, если для любого элемента g группы G фактор-пространство $A/C_A(g)$ конечномерно. Начало исследованию финитарных линейных групп было положено Ж. Дьедонне [1]. Им были впервые рассмотрены финитарные преобразования бесконечномерного векторного пространства. Следует отметить, что в данном направлении исследования получено много важных результатов [2, 3].

Условие финитарности является лишь одним из условий конечности, налагаемым на бесконечномерные линейные группы. В [4] были введены в рассмотрение антифинитарные линейные группы. Пусть $G \leq GL(F, A)$, $A(wFG)$ — фундаментальный идеал группового кольца FG , $\text{augdim}_F(G) = \dim_F(A(wFG))$. Линейная группа G называется антифинитарной, если каждая собственная подгруппа H группы G , для которой размерность $\text{augdim}_F(H)$ бесконечна, конечно порождена. В [4] исследовались антифинитарные локально разрешимые линейные группы.

Если G — подгруппа группы $GL(F, A)$, то A можно рассматривать как модуль над групповым кольцом FG . В теории модулей существует ряд обобщений понятия конечномерного векторного пространства. Это модули, обладающие конечным композиционным рядом, конечно порожденные модули, нетеровы модули, артиновы модули. Естественным обобщением классов артиновых и нетеровых модулей является класс минимаксных модулей ([5, гл. 7]).

Определение 1. Пусть A — модуль над кольцом \mathbf{R} . Модуль A называется минимаксным, если он обладает конечным рядом подмодулей, каждый фактор которого является либо нетеровым \mathbf{R} -модулем, либо артиновым \mathbf{R} -модулем.

Б. А. Ф. Верфриц ввел в рассмотрение артиново-финитарные группы автоморфизмов модуля M над кольцом \mathbf{R} и нетерово-финитарные группы автоморфизмов модуля M над кольцом \mathbf{R} , являющиеся аналогами финитарных линейных групп [6–8]. Группа автоморфизмов $F_1 \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$ модуля M над кольцом \mathbf{R} называется артиново-финитарной, если $A(g-1)$ является артиновым \mathbf{R} -модулем для любого элемента $g \in F_1 \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$. Группа автоморфизмов $F \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$ модуля M над кольцом \mathbf{R} называется нетерово-финитарной, если $A(g-1)$ является нетеровым \mathbf{R} -модулем для любого элемента $g \in F \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$. Б. А. Ф. Верфриц исследовал связь между группами $F_1 \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$ и $F \text{Aut}_{\mathbf{R}} M$ [8]. Эти группы имеют достаточно подобную структуру, особенно в случае коммутативных колец. В связи с этим естественно возник вопрос о том, не является ли один из этих классов групп подклассом другого. Данный вопрос был решен отрицательно Б. А. Ф. Верфрицем на примере кольца целых чисел [9].

При изучении модулей над групповыми кольцами с различными условиями конечности важную роль играет понятие коцентрализатора подгруппы в модуле A , введенное в [10].

Определение 2 [10]. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, где \mathbf{R} — кольцо, G — группа. Если $H \leq G$, то фактор-модуль $A/C_A(H)$, рассматриваемый как \mathbf{R} -модуль, называется коцентрализатором подгруппы H в модуле A .

Автором рассматривается аналог антифинитарных линейных групп в теории модулей над групповыми кольцами. Далее всюду изучается $\mathbf{R}G$ -модуль A такой, что $C_G(A) = 1$.

Определение 3. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, где \mathbf{R} — кольцо, G — группа. Будем говорить, что группа G является AFN-группой, если любая собственная подгруппа H группы G , коцентрализатор которой в модуле A не является нетеровым \mathbf{R} -модулем, конечно порождена. Группа G является AFA-группой, если любая собственная подгруппа H группы G , коцентрализатор которой в модуле A не является артиновым \mathbf{R} -модулем, конечно порождена. Группа G является AFM-группой, если любая собственная подгруппа H группы G , коцентрализатор которой в модуле A не является минимаксным \mathbf{R} -модулем, конечно порождена.

В работе изучаются модули над групповыми кольцами с коммутативным кольцом скаляров. В частности, рассматривается случай дедекиндова кольца скаляров. Напомним, что кольцо \mathbf{R} называется дедекиндовым кольцом, если выполняются следующие условия: 1) \mathbf{R} — область целостности; 2) \mathbf{R} — нетерово кольцо; 3) каждый ненулевой простой идеал кольца \mathbf{R} является максимальным идеалом; 4) кольцо \mathbf{R} целозамкнуто.

В [11–13] исследовались локально разрешимые AFN-, AFA-, AFM-группы. Структура этих групп описывается в теореме 1.

Теорема 1 [13]. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, G — локально разрешимая группа. Справедливы следующие утверждения:

- 1) если G — AFM-группа, $\mathbf{R} = \mathbb{Z}$ — кольцо целых чисел, то группа G гиперабелева;
- 2) если G — AFN-группа, \mathbf{R} — коммутативное нетерово кольцо с единицей, то группа G гиперабелева;
- 3) если G — AFA-группа, \mathbf{R} — дедекиндово кольцо, то группа G гиперабелева.

Назовем рядом вида (1) возрастающий ряд нормальных подгрупп группы G

$$\langle 1 \rangle = L_0 \leq L_1 \leq L_2 \leq \dots \leq L_\gamma \leq \dots \leq L_\delta = G$$

такой, что каждый фактор $L_{\gamma+1}/L_\gamma$, $\gamma < \delta$, гиперабелев.

В случае, когда \mathbf{R} является произвольным коммутативным кольцом, имеет место следующая теорема.

Теорема 2 [12]. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, \mathbf{R} — коммутативное кольцо, G — локально разрешимая AFN-группа. Тогда группа G обладает рядом вида (1).

Естественным обобщением локально разрешимых групп являются гипер(локально разрешимые) группы. Напомним, что группа G называется гипер(локально разрешимой), если G обладает возрастающим рядом нормальных подгрупп

$$\langle 1 \rangle = L_0 \leq L_1 \leq L_2 \leq \dots \leq L_\gamma \leq \dots \leq L_\delta = G$$

таким, что каждый фактор $L_{\gamma+1}/L_\gamma$, $\gamma < \delta$, локально разрешим.

При изучении гипер(локально разрешимых) AFA-, AFN- и AFM-групп важную роль играют леммы 1 и 2.

Лемма 1. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, G — гипер(локально разрешимая) группа. Имеют место следующие утверждения:

1) если G — AFM-группа, $\mathbf{R} = \mathbb{Z}$ — кольцо целых чисел и коцентральный идеал группы G в модуле A является минимаксным \mathbf{R} -модулем, то группа G гиперабелева;

2) если G — AFN-группа, \mathbf{R} — коммутативное нетерово кольцо с единицей и коцентральный идеал группы G в модуле A является нетеровым \mathbf{R} -модулем, то группа G гиперабелева;

3) если G — AFA-группа, \mathbf{R} — дедекиндово кольцо и коцентральный идеал группы G в модуле A является артиновым \mathbf{R} -модулем, то группа G гиперабелева.

Лемма 2. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, G — гипер(локально разрешимая) AFN-группа, \mathbf{R} — коммутативное кольцо. Если коцентральный идеал группы G в модуле A является нетеровым \mathbf{R} -модулем, то группа G обладает рядом вида (1).

Свойства гипер(локально разрешимых) AFA-, AFN- и AFM-групп описываются теоремами 3 и 4.

Теорема 3. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, G — гипер(локально разрешимая) группа. Справедливы следующие утверждения:

(1) если G — AFM-группа, $\mathbf{R} = \mathbb{Z}$ — кольцо целых чисел, то группа G обладает рядом вида (1);

(2) если G — AFN-группа, \mathbf{R} — коммутативное нетерово кольцо с единицей, то группа G обладает рядом вида (1);

(3) если G — AFA-группа, \mathbf{R} — дедекиндово кольцо, то группа G обладает рядом вида (1).

Теорема 4. Пусть A — $\mathbf{R}G$ -модуль, \mathbf{R} — коммутативное кольцо, G — гипер(локально разрешимая) AFN-группа. Тогда группа G обладает рядом нормальных подгрупп

$$\langle 1 \rangle = L_0 \leq L_1 \leq L_2 \leq \dots \leq L_\gamma \leq \dots \leq L_\delta = G$$

таким, что каждый фактор $L_{\gamma+1}/L_\gamma$, $\gamma < \delta$, имеет ряд вида (1).

Следует отметить, что как в случае локально разрешимых AFN-групп, так и в случае гипер(локально разрешимых) AFN-групп, структура рассматриваемых групп существенно зависит от структуры кольца \mathbf{R} . Это связано с тем, что структура группы автоморфизмов конечно порожденного модуля над произвольным коммутативным кольцом значительно сложнее, чем структура группы автоморфизмов конечно порожденного модуля над коммутативным нетеровым кольцом ([14, гл. 13]).

1. Dieudonne J. Les determinants sur un corps non commutative // Bull. Math. Soc. France. — 1943. — **71**. — P. 27–45.

2. Phillips R. E. The structure of groups of finitary transformations // J. Algebra. – 1988. – **119**, No 2. – P. 400–448.
3. Phillips R. E. Finitary linear groups: a survey // Finite and locally finite groups / NATO ASI ser. C. Math. Phys. Sci. – Dordrecht: Kluwer, 1995. – Vol. 471. – P. 111–146.
4. Kurdachenko L. A., Muñoz-Escolano J. M., Otal J. Antifinitary linear groups // Forum Math. – 2008. – **20**, No 1. – P. 27–44.
5. Kurdachenko L. A., Subbotin I. Ya., Semko N. N. Insight into modules over Dedekind domains. – Kyiv: Institute of Mathematics of the NAS of Ukraine, 2008. – 119 p.
6. Wehrfritz B. A. F. Artinian-finitary groups over commutative rings // Ill. J. Math. – 2003. – **47**, No 1–2. – P. 551–565.
7. Wehrfritz B. A. F. Artinian-finitary groups over commutative rings and non-commutative rings // J. Lond. Math. Soc. (2). – 2004. – **70**, No 2. – P. 325–340.
8. Wehrfritz B. A. F. Artinian-finitary groups are locally normal-finitary // J. Algebra. – 2005. – **287**, No 2. – P. 417–431.
9. Wehrfritz B. A. F. Finitary and artinian-finitary groups over the integers \mathbb{Z} // Ukr. Math. J. – 2002. – **54**, No 6. – P. 753–763.
10. Курдаченко Л. А. О группах с минимаксными классами сопряженных элементов // Бесконечные группы и примыкающие алгебраические структуры. – Киев, 1993. – С. 160–177.
11. Дашкова О. Ю. Локально разрешимые AFN-группы // Проблемы физики, математики и техники. – 2012. – № 3(12). – С. 58–64.
12. Dashkova O. Yu. On locally soluble AFN-groups // Algebra Discrete Math. – 2012. – **14**, No 1. – P. 37–48.
13. Дашкова О. Ю. О модульных аналогах антифинитарных линейных групп // Итоги науки. Юг России. Сер. Мат. форум. Т. 6. Группы и графы. – Владикавказ, 2012. – С. 18–24.
14. Wehrfritz B. A. F. Infinite linear groups. – Ergebnisse der Mathematik und ihrer Grenzgebiete. – New York; Heidelberg; Berlin: Springer, 1973. – 229 p.

Днепропетровский национальный университет
им. Олеся Гончара

Поступило в редакцию 11.02.2013

О. Ю. Дашкова

Модулі над груповими кільцями узагальнено розв'язних груп

Нехай A – $\mathbf{R}G$ -модуль такий, що \mathbf{R} – комутативне кільце, $A/C_A(G)$ не є нетеровим \mathbf{R} -модулем (відповідно $A/C_A(G)$ не є артиновим \mathbf{R} -модулем, $A/C_A(G)$ не є мінімакним \mathbf{R} -модулем), $C_G(A) = 1$, G – гіпер(локально розв'язна) група. Описано властивості гіпер(локально розв'язної) групи G такої, що кожна власна підгрупа H групи G , для якої $A/C_A(H)$ не є нетеровим \mathbf{R} -модулем (відповідно $A/C_A(H)$ не є артиновим \mathbf{R} -модулем, $A/C_A(H)$ не є мінімакним \mathbf{R} -модулем), скінченно породжена.

O. Yu. Dashkova

Modules over group rings of generalized soluble groups

Let A be an $\mathbf{R}G$ -module, where \mathbf{R} is a commutative ring, $A/C_A(G)$ is not a Noetherian \mathbf{R} -module (respectively, $A/C_A(G)$ is not an Artinian \mathbf{R} -module, and $A/C_A(G)$ is not a minimax \mathbf{R} -module), $C_G(A) = 1$, G is a hyper(locally soluble) group. We describe the properties of a hyper(locally soluble) group G such that each proper subgroup H of G , for which $A/C_A(H)$ is not a Noetherian \mathbf{R} -module (respectively, $A/C_A(H)$ is not an Artinian \mathbf{R} -module, and $A/C_A(H)$ is not a minimax \mathbf{R} -module) is finitely generated.

Про деякі питання теорії фаззі-груп

(Представлено членом-кореспондентом НАН України В. П. Моторним)

Довільну фаззі-групу можна розглядати як сукупність її фаззі-точок. Запропоновано "точковий" підхід до вивчення структури довільної фаззі-групи, визначеної на абстрактній групі. Розглянуто нормальні, зростаючі та переставні фаззі-підгрупи довільної фаззі-групи, отримано їх характеристики та властивості.

Нехай G — група, на якій задана мультиплікативна бінарна операція. Одиничний елемент G позначатимемо через e , щоб уникнути плутанини з числом 1. Нагадаємо, що фаззі-групою на G називається відображення $\gamma: G \rightarrow [0, 1]$, яке задовольняє такі умови:

(FSG 1) $\gamma(xy) \geq \gamma(x) \wedge \gamma(y)$ для довільних $x, y \in G$;

(FSG 2) $\gamma(x^{-1}) \geq \gamma(x)$ для довільних $x \in G$

(див., наприклад, [1, 1.2]). У російськомовній літературі використовується термін нечітка група, але, на наш погляд, він не зовсім відображає суть, тому ми вважаємо за краще використовувати кальку з англійського терміну.

Тут і далі якщо $W \in [0, 1]$, то $\wedge W$ позначає найбільшу нижню границю W , а $\vee W$ — найменшу верхню границю W . У випадку, коли $W = \{a, b\}$, замість $\wedge W$ (відповідно $\vee W$) будемо писати $a \wedge b$ (відповідно $a \vee b$).

Якщо γ, κ — фаззі-групи на G та $\gamma \subseteq \kappa$, то говоритимемо, що γ є фаззі-підгрупою κ і позначатимемо це символом $\gamma \preceq \kappa$.

Якщо Y — підмножина G та $a \in [0, 1]$, то через $\chi(Y, a)$ позначатимемо функцію, визначену за правилом

$$\chi(Y, a) = \begin{cases} a, & \text{якщо } x \in Y, \\ 0, & \text{якщо } x \notin Y. \end{cases}$$

Якщо H — підгрупа G , то $\chi(H, a)$ — фаззі-група на G . Якщо $Y = \{y\}$, то замість $\chi(\{y\}, a)$ використовуватимемо коротший запис $\chi(y, a)$; $\chi(y, a)$ називається фаззі-точкою.

Нехай L — підгрупа G і γ — фаззі-група на G . Визначимо функцію $L|^\gamma: G \rightarrow [0, 1]$ за правилом

$$L|^\gamma(x) = \begin{cases} \gamma(x), & \text{якщо } x \in L, \\ 0, & \text{якщо } x \notin L. \end{cases}$$

Якщо x, y — довільні елементи G , то не важко перевірити, що $L|^\gamma(xy) \geq L|^\gamma(x) \wedge L|^\gamma(y)$. Звідси випливає, що $L|^\gamma$ буде фаззі-групою на G .

Теорія фаззі-груп, як і інших алгебраїчних фаззі-структур, виникла зразу після виникнення теорії фаззі-множин. У рамках цієї теорії працювало досить багато алгебраїстів, отримано дуже багато різноманітних результатів. Деякі з них були зібрані в книзі [1]. Але це, скоріше, механічне зібрання, результати не систематизовано, їх подання досить хаотичне.

З нашої точки зору, однією з головних задач теорії фаззі-груп є вивчення алгебраїчних властивостей довільних фаззі-груп, які визначені на абстрактній групі G . Тут отримано цілий масив результатів, які стосуються будови найбільшої фаззі-групи $\chi(G, 1)$. Але між $\chi(G, 1)$ та довільною фаззі-групою на G існує велика відмінність. Якщо λ — фаззі-підгрупа фаззі-групи γ , яка визначена на G , має деякі властивості по відношенню до γ , то вона далеко не завжди має ті ж самі властивості по відношенню до $\chi(G, 1)$, і навпаки. Якщо розглядати довільну фаззі-групу γ як множину своїх фаззі-точок, то вона є напівгрупою з одиницею відносно операції множення фаззі-множин. І якщо множина тих елементів найбільшої фаззі-групи $\chi(G, 1)$, які мають обернені, є досить великою (усі фаззі-точки $\chi(g, 1)$, $g \in G$, мають обернені), що дає можливість застосування природної дії групи G на $\chi(G, 1)$, то цього вже не скажеш про довільну фаззі-групу, у якої множина елементів, що мають обернені, може бути дуже малою. Це і пояснює таку велику різницю між кількістю результатів про структуру фаззі-групи $\chi(G, 1)$ та структуру довільної фаззі-групи, що визначена на тій самій групі G . Нашою метою якраз і є розпочати систематичне вивчення будови довільної фаззі-групи, визначеної на абстрактній групі G . Почнемо з необхідних та достатніх умов для того, щоб фаззі-множина була фаззі-групою. Дуже корисним виявився нижченаведений “точковий” критерій. Але спочатку нагадаємо визначення добутку фаззі-множин.

Нехай μ, ν — фаззі-множини на групі G , визначимо операцію \bullet за таким правилом:

$$(\mu \bullet \nu)(x) = \bigvee_{y, z \in G, yz=x} (\mu(y) \wedge \nu(z)).$$

Зазначимо, що $(\mu \bullet \nu)(x) = \bigvee_{y \in G} (\mu(y) \wedge \nu(y^{-1}x)) = \bigvee_{z \in G} (\mu(xz^{-1}) \wedge \nu(z))$.

В книзі [1] для позначення цієї операції використовується символ \circ , тобто той символ, що стандартно використовується для позначення добутку функцій. Щоб уникнути будь-яких непорозумінь, ми використовуватимемо для операції множення фаззі-множин інший символ.

Твердження 1. *Нехай G — група. Фаззі-множина γ , визначена на G , тоді і тільки тоді є фаззі-групою, коли виконуються такі дві умови:*

(FSG 3) *з включень $\chi(x, a), \chi(y, b) \subseteq \gamma$ випливає, що $\chi(x, a) \bullet \chi(y, b) \subseteq \gamma$ для всіх $x, y \in \text{Supp}(\gamma)$;*

(FSG 4) *$\chi(x, a) \subseteq \gamma$ тягне за собою $\chi(x^{-1}, a) \subseteq \gamma$ для кожного $x \in \text{Supp}(\gamma)$.*

Розглянемо тепер інше важливе поняття. Нехай γ, κ — фаззі-групи на групі G і $\kappa \preceq \gamma$. Будемо говорити, що κ є нормальною фаззі-підгрупою γ , якщо $\kappa(yxy^{-1}) \geq \kappa(x) \wedge \gamma(y)$, для всіх елементів $x, y \in G$ [1, 1.4]. Ми позначатимемо це таким чином: $\kappa \trianglelefteq \gamma$. Для цього поняття ми також отримали “точковий” критерій, який уточнює твердження 3 роботи [2].

Твердження 2. *Нехай G — група, γ, κ — фаззі-групи на G та $\kappa \preceq \gamma$. Якщо κ — нормальна фаззі-підгрупа γ , то $\chi(x, \gamma(x)) \bullet \kappa \bullet \chi(x^{-1}, \gamma(x)) = \kappa$ для кожного елемента $x \in G$. Навпаки, якщо $\chi(x, \gamma(x)) \bullet \kappa \bullet \chi(x^{-1}, \gamma(x)) \preceq \kappa$ для кожного $x \in G$, то κ — нормальна фаззі-підгрупа в γ .*

Нехай γ, κ — фаззі-групи на групі G . Будемо говорити, що γ та κ можна переставити, якщо $\gamma \bullet \kappa = \kappa \bullet \gamma$. Слід зауважити, що у загальному випадку добуток двох фаззі-груп не є фаззі-групою. Має місце таке твердження: добуток двох фаззі-груп γ та κ буде фаззі-групою тоді і тільки тоді, коли $\gamma \bullet \kappa = \kappa \bullet \gamma$ (див., наприклад, [1, 4.3]). Якщо $\kappa \preceq \gamma$, то будемо говорити, що κ є переставною в γ , якщо $\lambda \bullet \kappa = \kappa \bullet \lambda$ для кожної $\lambda \preceq \gamma$.

Як ми побачимо далі, важливим прикладом переставних фаззі-підгруп є нормальні фаззі-підгрупи γ . У теорії абстрактних груп властивості переставних підгруп вивчаються досить довгий час. Існує великий масив статей, в яких отримані змістовні результати. Багато з них відображені в монографії [3]. Для переставних фаззі-підгруп ситуація кардинально відрізняється. Як і для багатьох інших властивостей, вивчення переставних фаззі-підгруп проводилось тільки в $\chi(G, 1)$. У роботах [4–7] та [1, 4.3] можна знайти деякі початкові результати для випадку, коли група G є скінченною. Вивчення переставних фаззі-підгруп $\chi(G, 1)$, коли G є довільною (не обов'язково скінченною), було ініційовано в [8, 9]. У даній роботі ми починаємо вивчати переставність у довільній фаззі-групі. Наведений нижче результат дає інформацію про структуру добутку $\gamma \bullet \kappa$.

Теорема 1. *Нехай G – група, γ, κ – фаззі-множини на G . Тоді*

$$\gamma \bullet \kappa = \bigcup_{y \in \text{Supp}(\gamma), z \in \text{Supp}(\kappa)} \chi(y, \gamma(y)) \bullet \chi(z, \kappa(z)).$$

Наслідок. *Нехай G – група.*

Якщо γ, λ, κ – фаззі-множини на G , причому $\lambda \subseteq \kappa$, то $\gamma \bullet \lambda \subseteq \gamma \bullet \kappa$ та $\lambda \bullet \gamma \subseteq \kappa \bullet \gamma$.

Якщо γ, λ_a – фаззі-множини на G , $a \in A$, то $\gamma \bullet \left(\bigcup_{a \in A} \lambda_a \right) = \bigcup_{a \in A} (\gamma \bullet \lambda_a)$ та $\left(\bigcup_{a \in A} \lambda_a \right) \bullet \gamma = \bigcup_{a \in A} (\lambda_a \bullet \gamma)$.

Нижчеподаний результат дає “точковий” критерій для переставності фаззі-підгрупи в довільній фаззі-групі.

Теорема 2. *Нехай G – група та γ – фаззі-група на G . Якщо $\kappa \preceq \gamma$, то κ буде переставною в γ тоді і тільки тоді, коли $\chi(\langle x \rangle, \gamma(x)) \bullet \kappa = \kappa \bullet \chi(\langle x \rangle, \gamma(x))$ для кожного $x \in \text{Supp}(\gamma)$.*

Нехай λ – фаззі-множина на G , $a \in [0, 1]$. Покладемо

$$L_a(\lambda) = \{x \mid x \in G \text{ і } \lambda(x) \geq a\}.$$

Підмножина $L_a(\lambda)$ називається a -рівнем λ . Нагадаємо, що якщо γ – фаззі-група на G , то або $L_a(\gamma)$ є підгрупою в G , або $L_a(\gamma) = \emptyset$. За допомогою рівнів можна дати таку характеристику фаззі-групи: γ є фаззі-групою на G тоді і тільки тоді, коли $L_a(\gamma)$ є підгрупою G для кожного $a \leq \gamma(e)$ (див., наприклад, [1, теорема 1.2.6]).

За допомогою поняття рівня отримуємо такий критерій переставності.

Теорема 3. *Нехай G – група та γ – фаззі-група на G . Якщо $\kappa \preceq \gamma$, то κ є переставною в γ тоді і тільки тоді, коли $L_a(\kappa)$ є переставною підгрупою в $L_a(\gamma)$, для кожного $a \leq \gamma(e)$.*

Зазначимо, що ця теорема є суттєвим узагальненням головного результату статті [8], у якій були отримані умови переставності фаззі-підгрупи в $\chi(G, 1)$ за деяких додаткових обмежень (так званий sup-property).

Наслідок 1. *Нехай G – група і γ – фаззі-група на G . Якщо її фаззі-підгрупа κ є переставною в γ , то $\text{Supp}(\kappa)$ є переставною підгрупою в $\text{Supp}(\gamma)$.*

Наслідок 2. *Нехай G – група і γ – фаззі-група на G . Якщо її фаззі-підгрупа κ є нормальною в γ , то κ є переставною підгрупою в γ .*

Нехай γ – фаззі-група на G , а μ – фаззі-множина на G та $\mu \subseteq \gamma$. Нагадаємо, що фаззі-підгрупа, породжена μ , це перетин всіх фаззі-підгруп γ , що містять у собі μ . Цю фаззі-підгрупу позначатимемо через $\langle \mu \rangle$. Ми вже зазначали вище, що у випадку, коли γ ,

κ — такі фаззі-групи, для яких $\gamma \bullet \kappa = \kappa \bullet \gamma$, то їх добуток $\gamma \bullet \kappa = \kappa \bullet \gamma$ також є фаззі-групою. Але на відміну від абстрактних груп $\gamma \bullet \kappa$ та $\langle \gamma, \kappa \rangle$ не обов'язково збігаються.

Наслідок 3. Нехай G — група і γ — фаззі-група на G . Якщо її фаззі-підгрупи λ, κ є переставними в γ , то $\langle \lambda, \kappa \rangle$ є переставною підгрупою в γ .

Як і для абстрактних груп, для фаззі-груп має місце тотожність Дедекінда.

Теорема 4. Нехай G — група, γ, κ, λ — фаззі-групи на G . Припустимо, що $\kappa \preceq \gamma$ та $\kappa \bullet \lambda = \lambda \bullet \kappa$. Тоді $\gamma \cap (\kappa \bullet \lambda) = \kappa \bullet (\gamma \cap \lambda)$ та $\gamma \cap \langle \kappa, \lambda \rangle = \langle \kappa, \gamma \cap \lambda \rangle$.

Наслідок. Нехай G — група і γ — фаззі-група на G . Тоді решітка всіх нормальних фаззі-підгруп γ є модулярною.

У випадку, коли $\gamma = \chi(G, 1)$, останнє твердження було отримано в роботах [10, 11].

Теорема 5. Нехай G — група та γ — фаззі-група на G . Підгрупа L з $\text{Supp}(\gamma)$ переставна в $\text{Supp}(\gamma)$ тоді і тільки тоді, коли $L|^\gamma$ переставна в γ .

Наслідок 1. Нехай G — група і γ — фаззі-група на G . Кожна фаззі-підгрупа з γ переставна в γ тоді і тільки тоді, коли кожна підгрупа $\text{Supp}(\gamma)$ є переставною в $\text{Supp}(\gamma)$.

Цей результат є суттєвим узагальненням теореми 3.2 роботи [8].

Наслідок 2. Нехай G — група і γ — фаззі-група на G . Якщо кожна фаззі-підгрупа з γ переставна в γ , то G є групою одного з таких типів:

(I) G — абелева група.

(II) $G = \times_{p \in \Pi(G)} G_p$, де G_p — силовська p -підгрупа G , яка задовольняє такі умови:

(i) якщо $p \neq 2$, то $G_p = B_p \langle a_p \rangle$, де B_p — нормальна абелева підгрупа експоненти p^k , та існує таке натуральне число t , що $t = 1 + p^m$, $m \leq k \leq m + d$, де $p^d = |G_p/B_p|$ та $a_p^{-1} b a_p = b^t$ для всіх $b \in B_p$;

(ii) якщо $p = 2$, то або G_p — дедекіндова група, або $G_p = B_p \langle a_p \rangle$, де B_p — нормальна абелева підгрупа експоненти p^k , та існує таке натуральне число t , що $t = 1 + p^m$, $2 \leq m \leq k \leq m + d$, де $p^d = |G_p/B_p|$ та $a_p^{-1} b a_p = b^t$ для всіх $b \in B_p$.

В обох випадках G_p є нільпотентною та обмеженою.

(III) G містить у собі таку нормальну абелеву періодичну підгрупу T , що G/T — вільна від скруту та локально циклічна. Більш того, кожна підгрупа T є G -інваріантною.

Нехай γ, κ — фаззі-групи на G та $\kappa \preceq \gamma$. Визначимо нормалізатор $N_\gamma(\kappa)$ фаззі-підгрупи κ в γ як об'єднання всіх фаззі-точок $\chi(x, a) \subseteq \gamma$, які задовольняють таку умову: $\chi(x^{-1}, a) \bullet \kappa \bullet \chi(x, a) = \kappa$.

Теорема 6. Нехай G — група, γ, κ — фаззі-групи на G та $\kappa \preceq \gamma$. Тоді нормалізатор $N_\gamma(\kappa)$ буде фаззі-підгрупою γ .

Твердження 2 показує, що κ є нормальною фаззі-підгрупою у своєму нормалізаторі $N_\gamma(\kappa)$.

Нехай γ — фаззі-група на G . Будемо говорити, що γ задовольняє нормалізаторну умову, якщо $N_\gamma(\kappa) \neq \kappa$ для будь-якої фаззі-підгрупи κ з γ .

Теорема 7. Нехай G — група та γ — фаззі-група на G . Якщо γ задовольняє нормалізаторну умову, то її носій $\text{Supp}(\gamma)$ також задовольняє нормалізаторну умову. Зокрема, $\text{Supp}(\gamma)$ є локально нільпотентною групою.

Нехай γ — фаззі-група на G . Її фаззі-підгрупа κ називається зростаючою підгрупою в γ , якщо існує зростаючий ряд

$$\kappa = \kappa_0 \trianglelefteq \kappa_1 \trianglelefteq \dots \trianglelefteq \kappa_\alpha \trianglelefteq \kappa_{\alpha+1} \trianglelefteq \dots \trianglelefteq \kappa_\beta = \gamma.$$

Теорема 8. Нехай G — група та γ — фаззі-група на G . Кожна фаззі-підгрупа γ є зростаючою тоді і тільки тоді, коли γ задовольняє нормалізаторну умову.

1. *Mordeson J. N., Bhutani K. R., Rosenfeld A.* Fuzzy group theory. – Berlin: Springer, 2005. – 300 p.
2. *Kurdachenko L. A., Grin K. O., Turbay N. A.* On hypercentral fuzzy groups // Algebra and Discrete Mathematics. – 2012. – **13**, No 1. – P. 92–106.
3. *Schmidt R.* Subgroups lattices of groups. – Berlin: Walter de Gruyter, 1994. – 572 p.
4. *Asaad M.* Groups and fuzzy subgroups // Fuzzy Sets and Systems. – 1991. – **39**. – P. 323–328.
5. *Asaad M., Abou-Zaid S.* Groups and fuzzy subgroups II // Ibid. – 1993. – **56**. – P. 375–377.
6. *Asaad M., Abou-Zaid S.* Characterization of fuzzy subgroups // Ibid. – 1996. – **77**. – P. 247–251.
7. *Asaad M., Abou-Zaid S.* A contribution to the theory of fuzzy subgroups // Ibid. – 1996. – **77**. – P. 355–369.
8. *Ajmal N., Thomas K. V.* Quasinormality and fuzzy subgroups // Ibid. – 1993. – **58**. – P. 217–225.
9. *Hassan N. H.* On permutable and mutually permutable fuzzy groups // Int. J. Appl. Math. and Statistic. – 2009. – **15**. – P. 556–558.
10. *Ajmal N., Thomas K. V.* The lattice of fuzzy subgroups and fuzzy normal subgroups // Inform. Sci. – 1994. – **76**. – P. 1–11.
11. *Ajmal N.* The lattice of fuzzy normal subgroups is modular // Ibid. – 1995. – **83**. – P. 199–209.

*Дніпропетровський національний університет
ім. Олеся Гончара*

Надійшло до редакції 15.02.2013

Л. А. Курдаченко, И. Я. Субботин, В. А. Чупордя, Е. А. Гринь

О некоторых вопросах теории фаззи-групп

Произвольную фаззи-группу можно рассматривать как совокупность ее фаззи-точек. Предложен “точечный” подход к изучению структуры произвольной фаззи-группы, определенной на абстрактной группе. Рассмотрены нормальные, возрастающие и перестановочные фаззи-подгруппы произвольной фаззи-группы, получены их характеристики и свойства.

L. A. Kurdachenko, I. Ya. Subbotin, V. A. Chupordya, K. O. Grin

On some questions in the theory of fuzzy groups

It is possible to consider an arbitrary fuzzy group as the union of its fuzzy points. The authors propose a “point” approach to the study of the structure of an arbitrary fuzzy group defined on an abstract group. Normal, ascendant, and permutable fuzzy subgroups of an arbitrary fuzzy group are considered, and their characteristics and properties have been obtained.



УДК 004.75:006.91:389:535.24

Член-кореспондент НАН України С. І. Ляшко, В. С. Ляшко,
П. І. Неежмаков, С. І. Зуб, С. С. Зуб

Грід-технологія для завдань метрології

Розглядаються різні варіанти використання прилад-елемента ІЕ в межах існуючої грід-технології при вирішенні завдань метрології, які для своєї реалізації потребують використання інформаційних технологій. Показано, що грід ІЕ є оптимальним середовищем для ефективного розв'язання задач метрології, що вимагають найвищого рівня безпеки при передачі, зберіганні та обробці даних вимірювань. Розкриваються нові можливості з відстежування результатів вимірювань та забезпечення високого рівня надійності цих результатів.

Розглянемо нові можливості, які надає кібернетика та її новий інструмент грід для розв'язання задач метрології.

У глобалізованому світі метрологічна діяльність має забезпечити простежуваність вимірювань в географічно рознесених регіонах, а також високу міру довіри до даних вимірювань у глобальних мережах [1].

Координація та керування процесами вимірювань, що часто розділені великими відстанями, вимагають підтримки з боку сучасних інформаційних технологій. Вважається, що таку підтримку можуть забезпечити технології інтернету. Проте в цій системі не передбачена можливість керування вимірювальними та обчислювальними процесами, а дані, що передаються, постійно знаходяться під загрозою фальсифікації і, навіть, незворотної втрати.

Проблеми дистанційної взаємодії з приладами, а також захисту даних вимірювань у глобальних мережах вирішуються [2–4], але ці рішення завжди мають частковий характер, вони пристосовані для розв'язання конкретної задачі та вимагають значних спеціальних зусиль. Чи є вихід? Відповідь позитивна. Одним з новітніх інструментів, який втілює в собі останні досягнення в області кібернетичної науки, є грід. Він забезпечує просторово розподілене операційне середовище з гнучким, безпечним та скоординованим розподілом ресурсів для виконання завдань у віртуальних організаціях (ВО) [5], що динамічно утворюються. Його було створено для керування та обміну науковими даними, а також для забезпечення їх колективного використання [6].

На фізично тому самому устаткуванні (тобто на тих самих елементах телекомунікацій, які використовує інтернет) може функціонувати якісно нова система глобальних розподіле-

© С. І. Ляшко, В. С. Ляшко, П. І. Неежмаков, С. І. Зуб, С. С. Зуб, 2013

них обчислень, яка забезпечує найвищий можливий на сьогодні рівень безпеки, що виключає навіть такі хворобливі явища, як віруси та хакерські атаки.

Існує багато реалізацій цієї концепції в США та Євросоюзі. Проте в останні роки лідируюче місце серед реалізацій грид-концепції займає gLite middleware.

Річ у тому, що саме gLite middleware використовується для обслуговування найскладнішої фізичної (водночас вимірювальної) установки, що була створена людством, — Великого адронного колайдера (Large Hadron Collider — LHC) в CERN (Європейська рада з ядерних досліджень) [7]. Там вперше зіткнулися з проблемою обмеженості обчислювальних ресурсів для обробки колосального обсягу інформації, що народжується в експериментах на LHC.

На прес-конференції в CERN, де було повідомлено про відкриття бозона Хіггса, генеральний директор CERN Рольф-Дітер Хойер заявив: “Без всесвітньої мережі розподілених обчислень ми не змогли б отримати необхідні нам результати. Обчислювальні потужності і мережа, які були задіяні CERN, стали дуже важливою частиною досліджень”.

Структура класичного гриду, що базується на gLite middleware, досить добре відома [8, 9]. Зараз gLite middleware набуває широкого поширення не лише для завдань фізики високих енергій, але і для вирішення складних завдань механіки твердого тіла [10], біології, медицини та в інших галузях науки і техніки.

Безпека в грид. Особливе значення для метрології має виключення ненавмисних або навмисних спотворень даних — результатів вимірювань, що передаються по мережах та зберігаються на віддалених пристроях.

Слід підкреслити, що безпека є складовою самого підґрунтя гриду. Її складовими є як спеціальні протоколи безпечної передачі даних, такі, як GSIFTP, Secure RFIO, Gsidcap, так і система авторизації, яка, в свою чергу, є багаторівневою та забезпечує глибоке розмежування прав доступу до ресурсів гриду.

Таким чином, система безпеки гриду має всі відомі на сьогодні засоби криптографії та забезпечена стрункою системою авторизації та розподілу прав, що спирається на електронні сертифікати.

Грид-елемент для засобів вимірювальної техніки. Як вже відзначалося, LHC є найскладнішою не лише фізичною, але і вимірювальною установкою, що створена людством. Здавалося б, на цьому прикладі вирішені всі завдання зі зв'язку засобів вимірювальної техніки (ЗВТ) та грид. Але це не зовсім так. LHC Computing Grid Project (LCG) та його наступник gLite middleware створювалися паралельно з налаштуванням детекторів LHC. Тому обробка даних детекторів є не програмним, а скоріш апаратно-програмним рішенням, що було можливим лише для розробників LCG/gLite. Але сьогодні все частіше “рядові” користувачі грид потребують інтеграції ЗВТ з грид для побудови інформаційно-вимірювальних систем з підвищеним захистом даних, що передаються на значні відстані, а також для дистанційного доступу до ЗВТ, в принципі, з будь-якого сайту в грид.

Для вирішення цих завдань був ініційований проект Grid Enabled Remote Instrumentation with Distributed Control and Computation (GRIDCC) [11]. Мета проекту — використання можливостей гриду щодо безпечної дистанційної спільної роботи команди дослідників із забезпечення моніторингу та керування даними ЗВТ, які генеруються та зберігаються на розподіленому науковому устаткуванні, з застосуванням традиційних ресурсів гриду.

В рамках цього проекту розроблено спеціальний інструмент, так званий ІЕ (або прилад-елемент), який успішно застосовується різними науковими колабораціями для дистанційної взаємодії між ЗВТ та середовищем гриду.

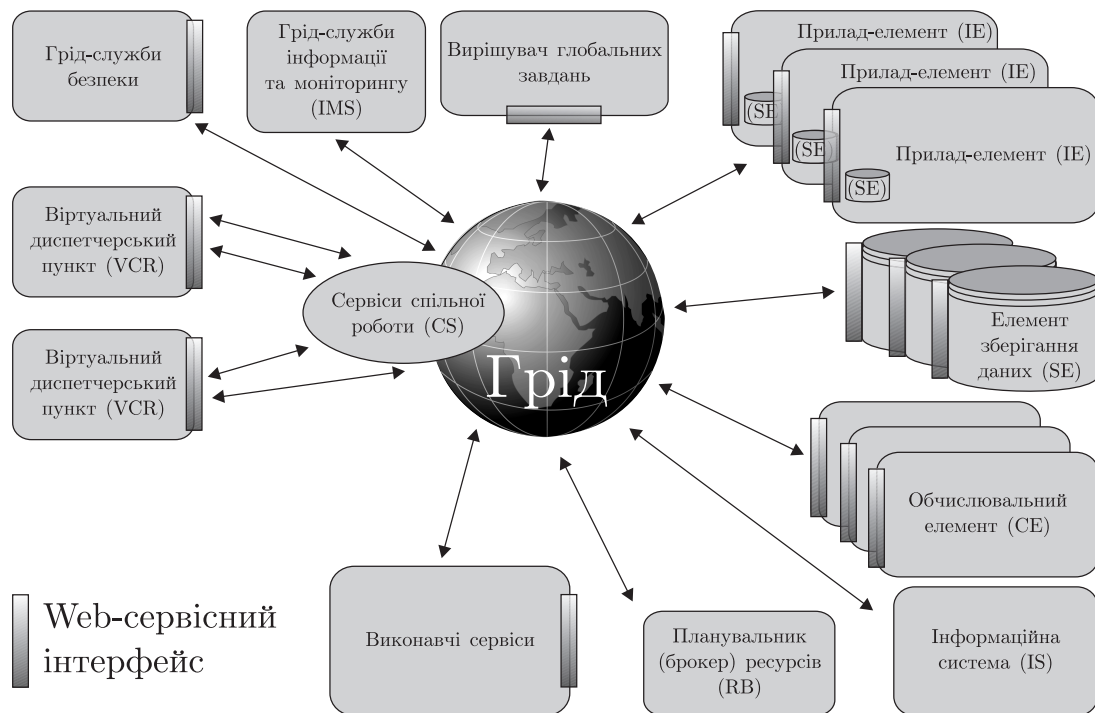


Рис. 1. Архітектура проекту GridCC

Як видно з рис. 1 [12], GridCC істотно розширює можливості традиційного ґрід, компоненти якого розташовані в правому нижньому куті рисунка.

Відносно новим елементом є VCR (віртуальний диспетчерський пункт), який забезпечує багатокористувацький інтерфейс, що розрахований на спільну роботу групи дослідників зі складною інформаційно-вимірювальною системою з розподілом функцій.

Ключовим елементом GridCC є, звичайно, сам ІЕ. Значок елемента зберігання даних (SE) всередині ІЕ показує, що ІЕ розроблявся на основі SE та унаслідував його властивості. Таким чином, ІЕ, як програмний модуль, є сервером, а його взаємодія з елементом SE може здійснюватися традиційним для класичного ґрід чином.

ІЕ складається із пов'язаного набору сервісів, які і забезпечують всю функціональність для конфігурації, керування та моніторингу вимірювальних приладів, що знаходяться за ІЕ інтерфейсом, який забезпечує їх взаємодію з ґрідом.

ІЕ забезпечує такі функціональні вимоги: уніфіковану модель вимірювального приладу; стандартний ґрід-доступ до приладів; можливість взаємодії між різними приладами, що належать різним інститутам у ВО.

Користувач ІЕ може мати одну з таких ролей: спостерігач, оператор або адміністратор.

При розробці абстрактної моделі ЗВТ була введена така класифікація ЗВТ: dummy instrument; smart instrument; smart instrument in an adhoc network.

Уніфікована модель ЗВТ має бути задана за допомогою опису на мові інструкцій, заснованій на XML [12]. Таким чином, ЗВТ в ґрід представляється своєю моделлю і є ґрід-сервісом, який “надає послуги” з вимірювання відповідних величин.

З рис. 2 видно, що між ґрід та ЗВТ знаходиться ІЕ. З одного боку, ми бачимо набори датчиків, ЗВТ або групу ЗВТ, які використовують наявні в них засоби керування і фізично

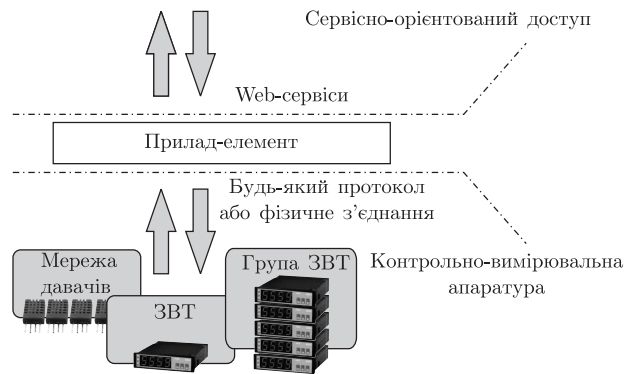


Рис. 2. Схема інтеграції ЗВТ в ґрид

підключені до комп'ютера з встановленим ІЕ. З іншого боку, користувач через ґрид має доступ до ІЕ через безпечний Web-інтерфейс.

ґрид та деякі задачі метрології. Розглянемо проблемні питання метрології, в яких застосування ґрид може привести до істотного підвищення ефективності метрологічної діяльності.

1. Довгострокове зберігання та передача даних вимірювань, а також завантаження нових версій програмного забезпечення (ПЗ) ЗВТ є предметом уваги законодавчої метрології, яка встановлює цілком певні вимоги до цих процесів. В документі WELMEC 7.2 “Настанова з програмного забезпечення” Європейській кооперації в області законодавчої метрології (WELMEC) ці вимоги сформульовані в розширеннях (extension) L, T, D.

ґрид був спеціально створений для вирішення подібних завдань, оскільки при розробці інструментарію ґрид було поставлено за мету не допустити жодних спотворень або втрат даних експерименту. Тому застосування ґрид та його компонента ІЕ автоматично вирішує завдання законодавчої метрології, сформульовані в розширеннях L, T, D Настанови WELMEC 7.2.

2. Дистанційні звірення. Сучасні інформаційні технології у багатьох випадках дозволяють дистанційно звіряти ЗВТ [3, 4]. Існують міжнародні програми з синхронізації часу, навігації та в інших сферах, в яких використовуються дистанційні звірення. ґрид здатний вивести ці підходи на абсолютно новий рівень як якісно, так і кількісно, забезпечуючи більшу продуктивність обробки та одночасний захист даних вимірювань.

3. Ключові звірення еталонів. Такі звірення часто є тривалими, трудомісткими та затратними процедурами. ґрид може надати ефективніші інструменти порівняно із звичайним: інтернет для виконання дистанційних звірень національних еталонів, проведення уніфікованих обчислювальних процедур, безпечного обміну інформацією.

Велика частина роботи, а в деяких випадках і вся, може бути виконана дистанційно. Ці можливості особливо перспективні в світлі неминучого переходу на еталони, що базуються на квантових ефектах і у зв'язку з майбутнім перевизначенням основних одиниць Міжнародної системи SI.

4. Прилади із вбудованою ОС. Складність ПЗ ЗВТ постійно зростає. Все більше застосування знаходять ЗВТ із вбудованою ОС Linux. Деякі з них підпадають під вимоги законодавчої метрології. Складність тестування таких систем та проблеми захисту даних вимірювання — актуальне завдання. Мають бути виконані вказані вище вимоги L, T, D Настанови WELMEC 7.2, що для таких систем є новим і непростим завданням [13].

Наявні інструменти грід у поєднанні з прилад-елементом ІЕ надають всі можливості для ефективного та безпечного вживання ЗВТ із вбудованою ОС Linux.

Як інший підхід до розв'язання задач вимірювань з використанням складного ПЗ ми пропонуємо використовувати концепцію “тонких клієнтів”. Інакше кажучи, прилади повинні мати мінімальне ПЗ, що забезпечує інтеграцію приладу в систему грід, а складна обробка “сирих” даних повинна виконуватися в середовищі грід. Вибір підходу залишається за розробниками вимірювального приладу.

5. Еталонне ПЗ. Одним з основних методів дослідження ПЗ ЗВТ є його порівняння з “еталонним” ПЗ. В той самий час поняття “еталонного” ПЗ не є достатньо визначеним. Крім того, порівняння може відбуватися як за результатами виконання коду, так і через буквальний збіг коду.

Грід в перспективі може надати поняттю “еталонного” ПЗ прозоре і більш прийнятне значення та виконувати порівняння на новому, вищому рівні. На наш погляд, провідні національні метрологічні інститути можуть поставити і виконати завдання створення сховища (repository) еталонного метрологічного ПЗ як одного з ресурсів грід за аналогією з gLite middleware repositories [8]. Саме таке ПЗ й повинно використовуватися при ключових звіреннях еталонів.

6. Еталонні тестові дані. Разом із попереднім завданням актуальною проблемою є створення грід-ресурса “еталонних” тестових даних або, ширше, тестових завдань [14]. Подібні завдання впродовж декількох років застосовувалися для тестування кластерів, що входять у систему комп'ютерного забезпечення експериментів на ЛНС на базі грід.

7. Smart Electrical Grid. Останнім часом велику увагу привертають так звані розумні лічильники, що дозволяють економити енергоресурси. Як наголошується в [15], однією з найважливіших цілей Європейської науково-дослідної програми з метрології (EMRP — European Metrology Research Programme) “є вдосконалення метрологічної інфраструктури в Європі для забезпечення успішної реалізації проекту інтелектуальних силових електричних мереж”. У словосполученні “Smart Electrical Grid” термін “Grid” означає силову електричну мережу, яка, на нашу думку, також може керуватися та обслуговуватися через грід.

Відзначимо, що наявна реалізація концепції грід — gLite middleware — разом з ІЕ надає повний набір інструментів для створення програм, що вирішують перераховані завдання в цій сфері [12].

Таким чином, ряд актуальних завдань метрології вимагає адекватної підтримки на основі найсучасніших інформаційних технологій. Такою технологією, що відповідає глобальним викликам часу і являє новий етап розвитку кібернетичних систем, за нашим переконанням, є грід. Створення компонента грід ІЕ робить цю систему оптимальним середовищем для ефективного моніторингу, керування і обслуговування вимірювальних ресурсів, що забезпечує найвищий рівень безпеки передачі, зберігання та обробки даних вимірювань, відкриває нові можливості для забезпечення метрологічної простежуваності та високого рівня довіри до результатів вимірювань.

1. *Neyezhnikov P. I.* 20 years of COOMET: We measure together for a better tomorrow // OIML Bulletin. – 2011. – **52**, No 3. – P. 32–37.
2. *Neyezhnikov P. I., Zub S. I., Zisky N., Neumann J.* Application of technologies of safe data transfer in metrology // Mathematics, Statistics and Computation to Support Measurement Quality International Seminar. – St. – Petersburg, 2009. – <http://mscsmq.vniim.ru/seminar-2009-en.html>.
3. *Sand A., Parkin G., Stevens M.* A generic approach to distributed instrumentation // PTB-BIPM workshop “Impact IT in Metrology”. – Berlin, 2007. – P. 115–123. – <http://bipm.org/en/events/>.

4. *Matsumoto H., Yoshida H.* Recent status of remote calibration (e-trace) system // *Ibid.* – Berlin, 2007. – P. 112–114. – <http://bipm.org/en/events/>.
5. *Foster I., Kesselman C., Nick J., Tuecke S.* The Physiology of the Grid: An Open Grid Services Architecture for Distributed Systems Integration // <http://www.globus.org/research/papers/ogsa.pdf>.
6. *Глушков В. М.* Кибернетика, вычислительная техника, информатика. ЭВМ – техническая база кибернетики. – Киев: Наук. думка, 1990. – 264 с.
7. *LHC Computing Grid* – Technical Design Report. – Geneva: CERN-LHCC – 2005. – **024**, 2005. – 153 p.
8. *Zub S., Levchuk L., Sorokin P., Soroka D.* Grid middleware configuration at the KIPT CMS Linux cluster // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A.* – 2006. – **559**, No 1. – P. 35–37.
9. *Демичев А. П., Ильин В. А., Кроков А. П.* Введение в грид-технологии. – Москва: НИИЯФ МГУ, 2007. – 87 с.
10. *Григор'єва Л. В., Козоріз В. В., Ляшко С. І.* Maple-моделювання динаміки тіла з нерухомою точкою в полі магнітних та електричних сил // *Доп. НАН України.* – 2007. – № 8. – С. 45–48.
11. *GRIDCC project* // <http://www.gridcc.org>.
12. *Lelli F., Frizziero E., Gulmini M. et al.* The many faces of the integration of instruments and the grid // *Int. J. Web and Grid Services.* – 2007. – **3**, No 3. – P. 239–266.
13. *Thiel F., Grottker U., Richter D.* The challenge for legal metrology of operating systems embedded in measuring instruments // *OIML Bulletin.* – 2011. – **52**, No 1. – P. 7–12.
14. *Cook H. R., Cox M. G., Dainton M. P., Harris P. H.* Methodology for testing spreadsheets and other packages used in metrology // *Report to National Measurement System Policy Unit*, 1999. – <http://publications.npl.co.uk>.
15. *Hossain K.* Global challenges for metrology // *NCSL International Workshop and Symposium*, 2010. – P. 12–15. – <http://www.ncsli.org>.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 21.02.2013

Член-корреспондент НАН України **С. І. Ляшко, В. С. Ляшко,
П. І. Неєжмаков, С. І. Зуб, С. С. Зуб**

Грид-технология для задач метрологии

Рассматриваются различные варианты использования приборного элемента IE в рамках существующей грид-технологии при решении метрологических задач, которые для своей реализации требуют применения информационных технологий. Показано, что грид IE является оптимальным окружением для эффективного решения задач измерений, которые требуют наивысшего уровня безопасности при передаче, хранении и обработке данных измерений. Раскрываются новые возможности по отслеживанию результатов измерений и обеспечению высочайшего уровня надежности этих результатов.

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

Grid technology for metrology tasks

The article describes the variety of possible IE applications within the available grid technology for those metrology tasks, where IT support is required. The IE grid becomes an optimal environment, which can be used to effectively perform measurement tasks which have the highest level of measurement data transfer, storage, and processing safety, revealing new opportunities to trace measurement results and to ensure a high level of reliability of these results.

Поиск программных инвариантов в виде полиномов

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины С. И. Ляшко)

Представлено решение проблемы поиска инвариантов программ в виде полиномиальных зависимостей методом верхней аппроксимации. Этот итерационный метод, с успехом примененный к программам над абсолютно свободными алгебрами и векторными пространствами данных, адаптирован для кольца полиномов. Множество инвариантов в этом случае представляется в виде идеала кольца полиномов. Решены задачи о соотношениях и о пересечении множеств инвариантов с использованием базисов Гребнера при условии невырожденности оператора присваивания.

1. После прорыва в теории верификации, связанного с появлением теории индуктивных утверждений Флойда–Хоара–Дейкстры [1] в 70-х гг. (Вебрейт, 1974, 1975; Герман и Вебрейт, 1975; Кац и Манна, 1976; Кузот и Кузот, 1976; Сузуки и Ишихата, 1977; Дершовицем и Манна, 1978), наступил тихий период в этой области. Оживление последовало с изучением средств автоматического доказательства теорем (САДТ) и верификации моделей программ вместо исходных программ. Все перечисленные подходы формальных доказательств свойств программы используют утверждения, которые истинны во время выполнения программы в качестве входных данных. Проблема поиска таких утверждений (инвариантов) остается особенно актуальной и по сей день.

Исследования в этой области велись и в СССР, особенно в Киеве и Новосибирске, в 70-х и 80-х гг. прошлого столетия. В результате были разработаны эффективные алгоритмы генерации инвариантов для программ. Проводились исследования следующих алгебр данных: абсолютно свободная алгебра данных [4, 12], группы, полугруппы, абелевы группы и абелевы полугруппы, векторное пространство [3], кольцо многочленов [9, 10].

Программа представлена в виде U – Y -схемы на алгебре многочленов. В данной работе итерационные алгоритмы, удачно примененные для абсолютно свободных алгебр и векторных пространств, адаптированы для полиномиальных пространств [7].

Инвариант U – Y -схемы в состоянии — это утверждение, которое верно для любого достижимого состояния памяти U – Y -схемы. Термин “состояние” далее обозначает состояние (узел) U – Y -схемы. Рассматриваемый подход строит базис инвариантных соотношений для каждого состояния программы, учитывая переданные соотношения на вход U – Y -схемы.

Эта работа была вызвана схожими работами по генерации инвариантов в виде полиномов с использованием базисов Гребнера (Мюллер-Олм и Зайдель, 2004; Санкарараянан, 2004; Родригес-Карбонелл и Капур, 2007). Рассмотренный итерационный метод позволяет генерировать более широкое множество инвариантов, что аргументирует его применение.

2. Обозначения. Пусть A — U – Y -схема над памятью [5] и $R = \{r_1, \dots, r_m\}$ — множество переменных, которое определено на алгебре данных (D, Ω) ; $K(\Omega, Eq)$ — класс алгебр, который включает в себя алгебру (D, Ω) [2]. Рассмотрим кольцо многочленов (D, Ω) и алгебру термов $T(\Omega, R)$ на R из класса $K(\Omega, Eq)$.

Определение 1 (алгебраическое соотношение). Алгебраическим соотношением Ψ называется соотношение вида $\bigwedge_i p_i(r_1, \dots, r_m) = 0$, где каждый $p_i \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_m]$. Степень соотношения — это максимальная степень среди степеней многочленов, которые составляют соотношение.

Определение 2 (идеал). Множество $I \subseteq \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$ называется идеалом тогда и только, когда:

- 1) $0 \in I$;
- 2) если $p_1, p_2 \in I$, то $p_1 + p_2 \in I$;
- 3) если $p_1 \in I$ и $p_2 \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$, то $p_1 p_2 \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$.

Идеалом, порожденным множеством многочленов N (обозначается $((N))$), называется минимальный идеал, содержащий N . Это равносильно $((N)) = \{g_1 p_1 + \dots + g_m p_m \mid g_1, \dots, g_m \in R[r_1, \dots, r_n], p_1, \dots, p_m \in P\}$. Идеал I считается конечно порожденным, если существует конечное множество N , так, что $I = ((N))$. Знаменитая теорема Гильберта утверждает, что все идеалы в $\mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$ являются конечнопорожденными. В результате алгебраические соотношения можно рассматривать как порождающие идеалы и наоборот. Любой идеал определяет многообразие, которое является множеством общих нулей всех полиномов, которые он содержит.

Определение 3 (пересечение идеалов). Множество K является пересечением идеалов $I = \{f_1, \dots, f_l\}$ и $J = \{g_1, \dots, g_m\}$, если

$$K = \left\{ s(r_1, \dots, r_n) \mid s(r_1, \dots, r_n) = \sum_{i=1}^l p_i f_i = \sum_{j=1}^m q_j g_j, p_1, \dots, p_l, q_1, \dots, q_m \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n] \right\}.$$

Теорема 1 (пересечение идеалов). Пусть I и J — идеалы в $R[r_1, \dots, r_n]$

$$I \cap J = (tI + (1-t)J) \cap \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n], \quad (1)$$

где $t \in R$ — новая введенная переменная [6].

Доказательство. Заметим, что $tI + (1-t)J$ является идеалом в $\mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n, t]$. Для доказательства истинности равенства мы докажем включение в обе стороны.

Пусть $f \in I \cap J$. Поскольку $f \in I$, то $tf \in tI$. Аналогично $f \in J$ следует $(1-t)f \in (1-t)J$. Получаем, что $f = tf + (1-t)f \in tI + (1-t)J$ и $I, J \subset \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$.

Чтобы доказать включение в обратную сторону, допустим $f \in (tI + (1-t)J) \cap \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$. Тогда $f(r) = g(r, t) + h(r, t)$, где $g(r, t) \in tI$ и $h(r, t) \in (1-t)J$. Сначала рассмотрим вариант $t = 0$. Исходя из того, что каждый элемент из tI умножается на t , $g(r, 0) = 0$, $f(r) = h(r, 0)$ и $f(r) \in J$. Рассмотрим вариант $t = 1$, тогда f можно представить в виде $f(r) = g(r, t) + h(r, t)$. Каждый элемент $(1-t)J$ умножается на $1-t$ и в результате $h(r, 1) = 0$. В этом случае $f(r) = g(r, 1)$ и $f(r) \in I$. Исходя из того, что f принадлежит I и J , $f \in I \cap J$. Получаем $I \cap J \supset (tI + (1-t)J) \cap \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$, что и завершает доказательство.

Пусть $A = \{a_0, a_1, \dots, a_*\}$ — множество вершин U - Y -схемы; N_{a_i} — базис соотношений в вершине a_i на текущем шаге метода; $N_{a_0}, N_{a_1}, \dots, N_{a_*}$ — базисы соотношений в вершинах U - Y -схемы; U — множество условий в виде $u = (p(r_1, \dots, r_n) = 0)$, где $p(r_1, \dots, r_n) \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$; Y — множество операторов присваивания в виде $r_i := p(r_1, \dots, r_n)$, где $p(r_1, \dots, r_n) \in \mathfrak{R}[r_1, \dots, r_n]$.

3. Метод верхней аппроксимации. Рассмотрим псевдокод метода верхней аппроксимации (МВА) с [2].

Вход: U–Y-схема A , N_0 — базис инвариантов в вершине a_0 .

Выход: $N_{a_0}, N_{a_1}, \dots, N_{a_*}$ — базисы инвариантов для каждой вершины.

```

 $N_{a_0} := N_0$ 
ToVisit.push( $a_0$ )
Visited := {}
while ToVisit  $\neq \emptyset$  do
   $c :=$  ToVisit.pop()
  Visited := Visited  $\cup$   $c$ 
  for all ( $c, y, a'$ ) do
    if Not  $a'$  in Visited then
       $N_{a'} := ef(N_{a'}, y)$ 
      ToVisit.push( $a'$ )
    end if
  end for
end while
ToVisit :=  $A/\{a_0\}$ 
while ToVisit  $\neq \emptyset$  do
   $c :=$  take from ToVisit
  if  $N_c \neq \emptyset$  then
     $N := N_c$ 
    forall ( $a', y, c$ ) do
       $N := N \cap ef(N_{a'}, y)$ 
    end for
    if ( $N \neq N_c$ ) then
       $N_c := N$ 
      ToVisit := ToVisit  $\cup$  { $a$  | for every ( $c, y, a$ )}
    end if
  end if
end while

```

Для применения метода для алгебры данных в виде кольца полиномов нужно решить три задачи: задача о соотношениях ($ef(\dots)$), пересечении (\cap) и стабилизации.

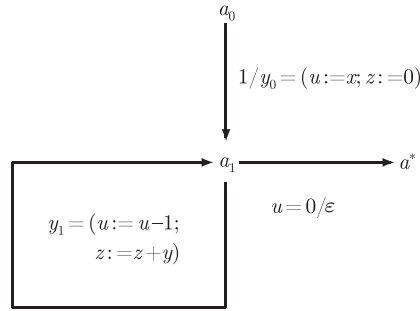


Рис. 1. U - Y -программа УМН (x, y)

Задача о соотношениях. Для данного базиса соотношений M и оператора присваивания $y \in Y$ построить базис соотношений $ef(M, y)$, которые истинны после выполнения оператора присваивания.

В работе рассмотрен частный случай, когда оператор присваивания обратимый. В этом случае равенство, которое представляет присваивание $r'_i = p(r_1, \dots, r_n)$, можно представить в виде $r_i = p'(r_1, \dots, r'_i, \dots, r_n)$, где r'_i — новое значение переменной. Заменяв старую переменную ее значением относительно нового значения переменной, получим базис соотношений, справедливый после выполнения оператора присваивания.

Задача пересечения. По заданным базисам множеств соотношений I и J построить базис множества соотношений $I \cap J$. Согласно теореме 1 о пересечении идеалов, пересечение можно построить, используя формулу (1).

Задача стабилизации. Доказать, что процесс работы метода построения базисов соотношений конечен. Исследование этой задачи не представлено в данной работе.

4. Реализация. Рассмотрим U - Y -программу из рис. 1. На этой программе мы продемонстрируем работу алгоритма, считая алгебру данных кольцом полиномов [8]. Применяя алгоритм МВА к этой U - Y -программе, получаем нижеприведенную цепочку вычислений и инвариантные соотношения.

На первом этапе алгоритма МВА генерируем начальные множества соотношений. Сначала множествам соотношений для всех состояний программы присваивается значение 1 ($\forall P: P \overset{*}{\cap} 1 = P$), при этом $ToVisit = \{a_0\}$.

Далее рассматриваем состояние a_0 из $ToVisit$, фиксируя $Visited = \{a_0\}$. Из состояния a_0 есть один переход $(a_0, 1, y = (u := x; z := 0), a_1)$.

Анализируя этот переход, множеству соотношений P_{a_1} присваиваем

$$P_{a_1} := ef(P_{a_0}, y) = ef(1, (u := x, z := 0)) = \{u - x = 0, z = 0\}.$$

При этом $ToVisit = \{a_1\}$.

Переходим к состоянию a_1 из $ToVisit$, фиксируя $Visited = \{a_0, a_1\}$. Из состояния a_1 есть два перехода $(a_1, (u \neq 0), (u := u - 1; z := z + y), a_1)$, $(a_1, (u = 0), \varepsilon, a^*)$. Исходя из $a_1 \in Visited$, рассмотрению подлежит только переход из a_1 в a^* .

Анализируя переход $(a_1, (u = 0), \varepsilon, a^*)$, находим целесообразным заменить этот переход следующим переходом $(a_1, 1, u := 0, a^*)$. То есть заменить обязательное условие перехода оператором присваивания. Множеству соотношений P_{a^*} присваиваем:

$$P_{a^*} := ef(P_{a_1}, y) = ef(\{u - x = 0, z = 0\}, \{u := 0\}) = \{x = 0, z = 0\}.$$

При этом $\text{ToVisit} = \{a^*\}$.

Переходим к состоянию a^* из ToVisit , фиксируя $\text{Visited} = \{a_0, a_1, a^*\}$. Нет переходов из состояния a^* . Исходя из $\text{ToVisit} = \emptyset$, первый этап МВА заканчиваем. Переходим ко второму этапу алгоритма.

На втором этапе алгоритма мы на каждом шаге итерации генерируем соотношения для состояний. После пересечения множества соотношений с полученными на предыдущем шаге. При инициализации $\text{ToVisit} = A/\{a_0\} = \{a_1, a^*\}$.

Переходим к состоянию a_1 из ToVisit $P = P_{a_1} = \{u - x = 0, z = 0\}$. В состояние a_1 есть два перехода $(a_0, 1, (u := x; z := 0), a_1)$, $(a_1, (u \neq 0), (u := u - 1; z := z + y), a_1)$.

Анализируя переход $(a_0, 1, (u := x; z := 0), a_1)$, множеству соотношений P присваиваем

$$\begin{aligned} P &:= P \bigcap^* ef(P_{a_0}, y) := P \bigcap^* ef(1, (u := x; z := 0)) = \\ &= \{u - x = 0, z = 0\} \bigcap^* \{u - x = 0, z = 0\} = \{u - x = 0, z = 0\}. \end{aligned}$$

Анализируя переход $(a_1, (u \neq 0), (u := u - 1; z := z + y), a_1)$, множеству соотношений P присваиваем

$$\begin{aligned} P &:= P \bigcap^* ef(P_{a_1}, y) := P \bigcap^* ef(\{u - x = 0, z = 0\}, (u := u - 1; z := z + y)) = \\ &= \{u - x = 0, z = 0\} \bigcap^* \{u + 1 - x = 0, z - y = 0\} = \\ &= \{z + (u - x)y = 0, z(y - z) = 0, zx - zu - z = 0, (u - x)^2 + u - x = 0\}. \end{aligned}$$

Исходя из $P \neq P_{a_1}$, присваиваем

$$\begin{aligned} P_{a_1} &:= \{z + (u - x)y = 0, z(y - z) = 0, zx - zu - z = 0, (u - x)^2 + u - x = 0\} \\ \text{и} \quad \text{ToVisit} &:= \text{ToVisit} \cup \{a_1, a^*\} = \{a_1, a^*\}. \end{aligned}$$

Переходим к состоянию a^* из ToVisit , фиксируя $\text{Visited} = \{a_1\}$ и $P = P_{a^*} = \{x = 0, z = 0\}$. В состояние a^* есть один переход $(a_1, 1, u := 0, a^*)$.

Анализируя переход $(a_1, 1, u := 0, a^*)$, множеству соотношений P присваиваем:

$$\begin{aligned} P &:= P \bigcap^* ef(P_{a_1}, y) = P \bigcap^* ef(\{z + (u - x)y = 0, z(y - z) = 0, zx - zu - z = 0, \\ &(u - x)^2 + u - x = 0\}, u := 0) = P \bigcap^* \{xy - z = 0, zy - z^2 = 0, zx - z = 0, x^2 - x = 0\} = \\ &= \{x = 0, z = 0\} \bigcap^* \{xy - z = 0, zy - z^2 = 0, zx - z = 0, x^2 - x = 0\} = \\ &= \{z(x - 1) = 0, z(y - z) = 0, (x^2 - x)u = 0, (xy - z)u = 0\}. \end{aligned}$$

Исходя из $P \neq P_{a^*}$, присваиваем $P_{a^*} := \{z(x - 1) = 0, z(y - z) = 0, (x^2 - x)u = 0, (xy - z)u = 0\}$.

Переходим к состоянию a_1 из ToVisit, фиксируя Visited = \emptyset и $P = P_{a_1} = \{z + (u - x)y = 0, z(y - z) = 0, zx - zu - z = 0, (u - x)^2 + u - x = 0\}$. В состоянии a_1 есть два перехода $(a_0, 1, (u := x; z := 0), a_1)$, $(a_1, (u \neq 0), (u := u - 1; z := z + y), a_1)$.

Анализируя переход $(a_0, 1, (u := x; z := 0), a_1)$, множеству соотношений P присваиваем:

$$\begin{aligned} P &:= P \bigcap^* ef(P_{a_0}, y) := P \bigcap^* \{u - x = 0, z = 0\} = \{z + (u - x)y = 0, z(y - z) = 0, \\ &zx - zu - z = 0, (u - x)^2 + u - x = 0\} \bigcap^* \{u - x = 0, z = 0\} = \\ &= \{(x - u)y - z = 0, zy - z^2 = 0, zx - zu - z = 0, (u - x)^2 + u - x = 0\}. \end{aligned}$$

Анализируя переход $(a_1, (u \neq 0), (u := u - 1; z := z + y), a_1)$, множеству соотношений P присваиваем

$$P := P \bigcap^* ef(P_{a_1}, y) := P \bigcap^* ef(P_{a_1}, (u := u - 1; z := z + y)) = \{xy - uy - z = 0, \dots\}.$$

Исходя из $P \neq P_{a_1}$, присваиваем

$$P_{a_1} := \{xy - uy - z = 0, \dots\} \quad \text{и} \quad \text{ToVisit} := \text{ToVisit} \bigcup \{a_1, a^*\} = \{a_1, a^*\}.$$

Переходим к состоянию a^* из ToVisit, фиксируя Visited = $\{a_1\}$ и $P = P_{a^*} = \{z(x - 1) = 0, z(y - z) = 0, (x^2 - x)u = 0, (xy - z)u = 0\}$. В состоянии a^* есть один переход $(a_1, 1, u := 0, a^*)$.

Анализируя этот переход, множеству соотношений P присваиваем: $P := P \bigcap^* ef(P_{a_1}, u := 0) := P \bigcap^* \{xy - z = 0, \dots\} = \{xy - z = 0, \dots\}$.

Исходя из $P \neq P_{a^*}$, присваиваем $P_{a^*} := \{xy - z = 0, \dots\}$.

Выполняя действия по алгоритму, мы заметили, что с каждой новой итерацией размерность базисов P_{a_1} и P_{a^*} остается неизменной, так же, как и один из многочленов этих базисов. Это многочлен $xy - uy - z = 0$ в a_1 и $xy - z = 0$ в a_* . Как мы видим из постановки задачи, инвариант $z = xy$ подтверждает правильность программы. В этом примере работа автоматического доказчика не понадобилась.

Таким образом, в работе представлены теоретические обоснования и реализация метода верхней аппроксимации для программ над кольцами полиномов. Инварианты программ приведены в виде идеалов. Идеалы, в свою очередь, задаются базисами Гребнера, операции над которыми удовлетворяют требованиям по применению МВА, изложенным в [2]. Метод реализован в программном комплексе Maple, который содержит мощные инструменты для символьных вычислений. Приведен пример функционирования разработанного метода.

1. Hoare T. The verifying compiler: A Grand challenge for computing research // J. of the ACM. – 2003. – No 50(1) – P. 63–69.
2. Годлевский А. Б., Капитонова Ю. В., Кривой С. Л., Летичевский А. А. Итеративные методы анализа программ. Равенства и неравенства // Кибернетика. – 1990. – № 3. – С. 1–9.
3. Кривой С. Л. Об одном алгоритме поиска инвариантных соотношений в программах // Там же. – 1981. – № 5. – С. 12–18.
4. Кривой С. Л. О поиске инвариантных соотношений в программах // Математическая теория проектирования вычислительных машин. – Киев: Изд. Ин-та кибернетики АН УССР, 1978. – С. 35–51.

5. *Летичевский А. А.* О поиске инвариантных соотношений в программах // Алгоритмы в современной математике – 1981. – № 122. – С. 304–314.
6. *Gröbner bases and applications* / Eds. B. Buchberger, F. Winkler. – Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1998. – 552 p.
7. *Максимец А. Н.* Поиск инвариантов U–Y-программ итерационным алгоритмом над совершенно свободными алгебрами данных // Пробл. програмування. – 2012. – № 2–3. – С. 228–333.
8. *Maksymets O. M.* Upper approximation method for polynomial invariants // Theoretical and Applied Aspects of Cybernetics. – Proceedings of the 2nd Intern. Scientific Conf. of Students and Young Scientists. Computer Science Section. – Kyiv, 2012. – P. 45–47.
9. *Lvov M. S.* About one algorithm of program polynomial invariants generation // Proc. Workshop on Invariant Generation: (Techn. rep.) Univ. of Linz / Eds. M. Giese, T. Jebelean. No 0707. – (RISC Report Series). Linz (Austria), 2007. – P. 85–99 (electronic).
10. *Львов М. С., Крежнин В. А.* Нелінійні інваріанти лінійних циклів та власні поліноми лінійних операторів // Кибернетика и системный анализ. – 2012. – № 2. – С. 126–140.
11. *Годлевский А. Б., Капитонова Ю. В., Кривой С. Л., Летичевский А. А.* Итеративные методы анализа программ. Равенства и неравенства // Кибернетика. – 1990. – № 3. – С. 1–9.
12. *Sabelfeld V. K.* Equivalent Transformationen für Flussdiagramme // Acta Informatica. – 1978. – 10. – P. 127–155.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Поступило в редакцію 28.01.2013

О. М. Максимець

Пошук програмних інваріантів у вигляді поліномів

Наведено рішення проблеми пошуку інваріантів програм у вигляді поліноміальних залежностей методом верхньої апроксимації. Цей ітераційний метод, вдало застосований для програм з абсолютно вільними алгебрами і векторними просторами даних, адаптований для кільця поліномів. Множина інваріантів в цьому випадку являє собою ідеал кільця поліномів. Розв'язані задачі про співвідношення і про перетин множин інваріантів з використанням базисів Грьобнера при умові невиродженості оператора присвоювання.

O. M. Maksymets

Polynomial invariants generation of programs

A solution of the polynomial invariant generation problem for programs is presented. The iteration upper approximation method which was successfully applied to free algebras is adopted for a polynomial ring. The set of invariants is interpreted as an ideal over a polynomial ring. The solutions of the relationship and intersection problems are proposed. An intersection of Gröbner bases is applied to solve the intersection problem. The inverse obligatory is applied to solve the relationship problem.

І. В. Малик

Збіжність у схемі усереднення диференціально-функціональних рівнянь нейтрального типу

(Представлено академіком НАН України В. С. Королюком)

Розглянуто достатні умови збіжності за ймовірністю випадкових процесів, що описуються диференціально-функціональними рівняннями нейтрального типу з випадковими операторами. Достатні умови сформульовано в термінах коефіцієнтів вихідного рівняння.

Вивченню стохастичних диференціальних рівнянь, в тому числі і стохастичних диференціально-функціональних рівнянь, присвячена велика кількість робіт, наприклад [1, 2, 7–10]. Особлива увага приділяється збіжності випадкових процесів у різних схемах [2–4, 7] та асимптотичній поведінці випадкових процесів. Серед даних робіт варто відзначити роботу [2], де розглянуто умови слабкої збіжності для марковських, напівмарковських процесів, напівмарковських випадкових еволюцій у схемі усереднення та дифузійної апроксимації в евклідовому просторі R^d .

На ймовірнісному базисі $(\Omega, F, \mathfrak{F}, P)$ [5], де $\mathfrak{F} := \{F_t, t \geq 0\}$ — потік σ -алгебр, задано сім'ю випадкових процесів $x^\varepsilon(t) := x(t, \varepsilon, \omega)$, $t \geq 0$, $\varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$, де $x^\varepsilon(t)$ — сильний розв'язок диференціально-функціонального рівняння (ДФР) в R^1 з випадковими операторами [7]

$$dD^\varepsilon x_t^\varepsilon = L^\varepsilon x_t^\varepsilon dt \quad (1)$$

та задовольняє невинячку початкову умову

$$x_0 = \varphi, \quad (2)$$

де для $\psi \in C([-h, \infty))$ визначені випадкові оператори:

$$D^\varepsilon \psi_t := \psi(t) - \int_{-h}^0 D(t, \psi(t-s), \varepsilon^{-1}s, \omega) ds,$$

$$L^\varepsilon \psi_t := \int_{-h}^0 L(t, \psi(t-s), \varepsilon^{-1}s, \omega) ds,$$

$\psi_t := \{\psi(t+s), s \in [-h, 0]\}$, $0 < h < \infty$. Тут $D, L: R_+ \times R^1 \times R_+ \times \Omega \rightarrow R^1$ — вимірні відображення, що задовольняють глобальну умову Ліпшица за другим аргументом м. н. з деякою константою l :

$$|D(t, \psi_1, s) - D(t, \psi_2, s)| + |L(t, \psi_1, s) - L(t, \psi_2, s)| \leq l \|\psi_1 - \psi_2\|, \quad (3)$$

де $\|\cdot\|$ — рівномірна норма на $[-h, 0]$.

Для відображення D будемо також вимагати таку умову [10]:

$$\sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_0), t \in R_+, \|\varphi\|=1} \int_{-h}^0 |D(t, \varphi(s), \varepsilon^{-1}s, \omega)| ds < 1, \quad (4)$$

яка є необхідною умовою існування розв'язку задачі (1), (2). При умовах (3) та (4) для $\forall \varepsilon \in (0, \varepsilon_0)$ м. н. існує єдиний розв'язок задачі (1), (2) [7, 10].

Припустимо, що при фіксованих $t \in R_+$ та $x \in R^1$ випадкові процеси D, L є стаціонарними за третім аргументом:

$$\bar{D}(t, x) := ED(t, x, s, \omega); \bar{L}(t, x) := EL(t, x, s, \omega).$$

Зауважимо, що при виконанні умов (3) та (4) існує єдиний розв'язок рівняння

$$d\bar{D}x_t^0 = \bar{L}x_t^0 dt \quad (5)$$

за початковою умовою (2), де

$$\bar{D}\psi_t := \psi(t) + \int_{-h}^0 \bar{D}(t, \psi(s)) ds, \quad \bar{L}\psi_t := \int_{-h}^0 \bar{L}(t, \psi(s)) ds.$$

Сформулюємо достатні умови збіжності за ймовірністю сім'ї випадкових процесів $x^\varepsilon(t)$, $t \geq 0$, визначені ДФР (1).

Теорема 1. *Нехай:*

- 1) $\varphi \in C([-h, 0])$ та виконується умова склеювання в точці 0: $\lim_{t \rightarrow 0^+} x^\varepsilon(t) = \varphi(0)$;
 - 2) $D(t, \psi, s, \omega), L(t, \psi, s, \omega)$ – вимірні за всіма змінними, ергодичні стаціонарні процеси за s при фіксованих t та ψ ;
 - 3) D, L задовольняють умову Ліпшица (3);
 - 4) $E|D(t, x, s, \omega)| + E|L(t, x, s, \omega)| < \infty$; $E|D(t, x, s, \omega)|, |D(t, x, s, \omega)|, E|L(t, x, s, \omega)|, |L(t, x, s, \omega)|$ – рівномірно інтегровні за t при фіксованих s, x .
- Тоді для $\forall T > 0$ та $\forall \delta > 0$ має місце співвідношення

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} P \left\{ \sup_{t \in [0, T]} |x^\varepsilon(t) - x^0(t)| > \delta \right\} = 0, \quad (6)$$

де $x^0(t), t \geq 0$ – розв'язок задачі Коші (5), (2).

Доведення. Розглянемо різницю $|x^\varepsilon(t) - x^0(t)|$, скориставшись інтегральним поданням розв'язків $x^\varepsilon(t), t \in [0, T], \varepsilon \in [0, \varepsilon_0]$ та означенням D^ε, \bar{D} :

$$\begin{aligned} |x^\varepsilon(t) - x^0(t)| &= \left| \int_{-h}^0 (D(t, x^\varepsilon(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \bar{D}(t, x^0(t+s))) ds + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \int_{-h}^0 (L(s, x^\varepsilon(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \bar{L}(s, x^0(s+s_1))) ds_1 ds \right| \leq \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \int_{-h}^0 |D(t, x^\varepsilon(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \overline{D}(t, x^0(t+s))| ds + \\
&\quad + \int_0^t \int_{-h}^0 |L(s, x^\varepsilon(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \overline{L}(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds \leq \\
&\leq \int_{-h}^0 |D(t, x^\varepsilon(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - D(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega)| ds + \\
&\quad + \int_{-h}^0 |D(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \overline{D}(t, x^0(t+s))| ds + \\
&\quad + \int_0^t \int_{-h}^0 |L(s, x^\varepsilon(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - L(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega)| ds_1 ds + \\
&\quad + \int_0^t \int_{-h}^0 |L(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \overline{L}(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds \leq \\
&\leq l(T, h) \sup_{t \in [0, T]} |x^\varepsilon(t) - x^0(t)| + \Psi_\varepsilon(t, \omega),
\end{aligned}$$

де $l(T, h) < \infty$,

$$\begin{aligned}
\Psi_\varepsilon(t, \omega) &:= \int_{-h}^0 |D(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \overline{D}(t, x^0(t+s))| ds + \\
&\quad + \int_0^t \int_{-h}^0 |L(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \overline{L}(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds.
\end{aligned} \tag{7}$$

Згідно з нерівністю Гронуолу–Белмана, отримаємо

$$\sup_{t \in [0, T]} |x^\varepsilon(t) - x^0(t)| \leq \sup_{t \in [0, T]} \Psi_\varepsilon(t, \omega) e^{lT} = \Psi_\varepsilon(T, \omega) e^{lT}.$$

Отже, для доведення твердження теореми (6) достатньо показати, що за ймовірністю виконується співвідношення

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Psi_\varepsilon(T, \omega) = 0. \tag{8}$$

Для доведення (8) розглянемо випадкові процеси

$$D_m(t, x, s, \omega) := \begin{cases} D(t, x, s, \omega), & \text{якщо } |D(t, x, s, \omega)| < m; \\ m \times \text{sign}(D(t, x, s, \omega)), & \text{якщо } |D(t, x, s, \omega)| \geq m. \end{cases}$$

$$L_m(t, x, s, \omega) := \begin{cases} L(t, x, s, \omega), & \text{якщо } |L(t, x, s, \omega)| < m; \\ m \times \text{sign}(L(t, x, s, \omega)), & \text{якщо } |L(t, x, s, \omega)| \geq m. \end{cases}$$

$$\bar{D}_m := ED_m, \quad \bar{L}_m := EL_m.$$

Згідно з означенням $\Psi_\varepsilon(t, \omega)$ (див. (7)), отримаємо

$$\Psi_\varepsilon(t, \omega) \leq \Psi_\varepsilon^1(t, \omega) + \Psi_\varepsilon^2(t, \omega) + \Psi_\varepsilon^3(t, \omega),$$

де

$$\begin{aligned} \Psi_\varepsilon^1(t, \omega) &:= \int_{-h}^0 |D(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - D_m(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega)| ds + \\ &+ \int_0^t \int_{-h}^0 |L(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - L_m(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega)| ds_1 ds, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_\varepsilon^2(t, \omega) &:= \int_{-h}^0 |D_m(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \bar{D}_m(t, x^0(t+s))| ds + \\ &+ \int_0^t \int_{-h}^0 |L_m(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \bar{L}_m(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_\varepsilon^3(t, \omega) &:= \int_{-h}^0 |\bar{D}(t, x^0(t+s)) - \bar{D}_m(t, x^0(t+s))| ds + \\ &+ \int_0^t \int_{-h}^0 |\bar{L}(s, x^0(s+s_1)) - \bar{L}_m(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds. \end{aligned}$$

Доведемо, що за ймовірністю виконуються співвідношення

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Psi_\varepsilon^i(T, \omega) = 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Згідно з умовою 4 теореми 1 та теоремою Лебега про граничний перехід під знаком інтеграла [6],

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \Psi_\varepsilon^3(t, \omega) = 0. \tag{9}$$

Розглянемо $\Psi_\varepsilon^1(T, \omega)$. Зауважимо, що згідно з умовою 4 теореми 1, справедлива нерівність

$$\sup_{\varepsilon \in (0, \varepsilon_0), m \in R_+} E\Psi_\varepsilon^1(T, \omega) < \infty.$$

Тому

$$\lim_{m \rightarrow \infty} E\Psi_\varepsilon^1(T, \omega) = 0.$$

Враховуючи, що $\Psi_\varepsilon^1(T, \omega) \geq 0$ м. н, отримаємо

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Psi_\varepsilon^1(T, \omega) = 0 \tag{10}$$

за ймовірністю.

Розглянемо доданок $\Psi_\varepsilon^2(T, \omega)$. Згідно з умовою 1 теореми 1, можна стверджувати, що випадкові процеси $x^\varepsilon(t)$, $\varepsilon \geq 0$ є неперервними м. н. на $[0, T]$. Тому можна вибрати константу c :

$$c := 1 + \max\left\{T, \sup_{t \in [-h, T]} |x^0(t)|\right\} < \infty.$$

Для $|x(t)| \leq c$, $t \in [0, T]$, використовуючи умову ергодичності 2 теореми 1 [2, 4, 5, 8], отримаємо співвідношення для процесів $D_m(t, x, s, \omega)$ та $L_m(t, x, s, \omega)$:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E \int_{-h}^0 D_m(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) ds &= \int_{-h}^0 \bar{D}_m(t, x^0(t+s)) ds, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E \int_0^t \int_{-h}^0 L_m(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) ds_1 ds &= \int_0^t \int_{-h}^0 \bar{L}_m(s, x^0(s+s_1)) ds_1 ds. \end{aligned}$$

Скориставшись даними співвідношеннями, отримаємо

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} E\Psi_\varepsilon^2(T, \omega) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(\int_{-h}^0 E|D_m(t, x^0(t+s), \varepsilon^{-1}s, \omega) - \bar{D}_m(t, x^0(t+s))| ds + \right. \\ &\quad \left. + \int_0^t \int_{-h}^0 E|L_m(s, x^0(s+s_1), \varepsilon^{-1}s_1, \omega) - \bar{L}_m(s, x^0(s+s_1))| ds_1 ds \right) = 0. \end{aligned}$$

Тоді, використовуючи невід'ємність $\Psi_\varepsilon^2(T, \omega)$, одержуємо

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \Psi_\varepsilon^2(T, \omega) = 0. \tag{11}$$

З умов (9)–(11) одержуємо співвідношення (8), а отже, і твердження теореми 1 (6).

Теорема 1 доведена.

Зауваження 1. Випадкові процеси $D(t, x, s)$, $L(t, x, s)$ за s при фіксованих $t \in R_+$ та $x \in R^1$ можуть бути стаціонарними як в широкому, так і у вузькому розумінні [7].

У даній роботі розглянуто достатні умови збіжності зі ймовірністю сім'ї випадкових процесів, що описуються ДФР (1) за умов, що накладаються на випадкові оператори відповідних ДФР. Результати даної роботи можна узагальнити на випадок нескінченної післядії з відповідними викладками. Теорема 1 дозволяє також моделювати розв'язок ДФР (5) за початковою умовою (2), використовуючи за наближення розв'язок задачі (1), (2) при достатньо малих ε .

Автор висловлює щирю вдячність за увагу до даної роботи та цінні поради проф. В. К. Ясинському та акад. НАН України В. С. Королюку.

1. *Kolmanovskia V., Koroleva N., Maizenberg T. et al.* Neutral stochastic differential delay equations with markovian switching // *Stoch. Analysis and Applications*. – 2003. – **21**, iss. 4. – P. 819–847.
2. *Koroliuk V. S., Limnios N.* Stochastic systems in merging phase space. – Singapore: World Scientific, 2005.
3. *Биллингсли П.* Сходимость вероятностных мер. – Москва: Наука, 1977. – 352 с.
4. *Дынкин Е. Б.* Марковские процессы. – Москва: Физматгиз, 1967. – 860 с.
5. *Жакод Ж., Ширяев А. Н.* Предельные теоремы для случайных процессов. В 2-х т. Т. 2. – Москва: Физматгиз, 1994. – 473 с.
6. *Колмогоров А. Н., Фомин С. В.* Элементы теории функций и функционального анализа. – Москва: Наука, 1989. – 624 с.
7. *Королюк В. С., Царков Є. Ф., Ясинський В. К.* Ймовірність, статистика та випадкові процеси. Теорія та комп'ютерна практика. В 3-х т. Т. 3. Випадкові процеси. Теорія та комп'ютерна практика. – Чернівці: Золоті литаври, 2009. – 798 с.
8. *Портенко Н. И., Скороход А. В., Шуренков В. М.* Марковские процессы. – Киев: ВИНТИ, 1989. – 248 с.
9. *Хасминський Р. З.* Устойчивость систем дифференциальных уравнений при случайном возмущении их параметров. – Москва: Наука, 1969. – 367 с.
10. *Хейл Дж.* Теория функционально-дифференциальных уравнений – Москва: Мир, 1984. – 421 с.

Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича

Надійшло до редакції 09.01.2013

И. В. Малык

Сходимость в схеме усреднения дифференциально-функциональных уравнений нейтрального типа

Рассмотрены достаточные условия сходимости по вероятности случайных процессов, описываемых дифференциально-функциональными уравнениями нейтрального типа со случайными операторами. Достаточные условия сформулированы в терминах коэффициентов исходного уравнения.

I. V. Malyk

Convergence in the averaging scheme for differential-functional equations of neutral type

We consider sufficient conditions for the convergence in probability of stochastic processes described by differential-functional equations of neutral type with random operators. The sufficient conditions are formulated in terms of the coefficients of the original equation.



УДК 531.39

К. В. Аврамов

К аэроупругому взаимодействию пластин с безвихревым идеальным газовым потоком

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины А. Е. Божко)

Предлагается метод исследования динамического взаимодействия пластин с течением идеального несжимаемого газа. Получена система сингулярных интегральных уравнений относительно перепада давлений, которая используется для решения задач аэроупругости пластин. Разработана численная процедура решения полученной системы сингулярных интегральных уравнений.

Для исследования аэроупругости пластин в потоке потенциальной жидкости большинство исследователей применяют сингулярные интегральные уравнения относительно плотности циркуляции [1–6]. При такой постановке задачи предполагается, что с задней кромки пластинки сходят свободные вихри, образуя вихревой след за пластинкой. Этот вихревой след является нестационарным и влияет на колебания пластинки. При исследовании динамики пластин в такой постановке приходится исследовать длительный переходный процесс, что приводит к значительным вычислительным затратам [7]. Более эффективным можно считать подход, в котором сингулярное интегральное уравнение записывается относительно перепада давления на поверхности пластинки. Так как перепад давления вне поверхности пластинки равен нулю, нет необходимости учитывать вихревой след за пластинкой. В такой постановке задачу о механических колебаниях можно решать как стационарную и предполагать, что давление на поверхности пластинки меняется по гармоническому закону. Тогда для оценки динамической устойчивости определяются характеристические показатели. Более того, в такой постановке задачи для исследования флаттера пластинки могут применяться хорошо зарекомендовавшие себя методы нелинейной динамики, такие как метод гармонического баланса, метод продолжения, нелинейные нормальные формы. Именно такой подход предлагается в данной работе.

Исследуем изгибные колебания прямоугольной пластинки в потоке газа (рис. 1). Ее поперечные перемещения описываются функцией $w(x, y, t)$, которая удовлетворяет следующему уравнению:

$$\frac{h^2}{12} \left(\frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^4} \right) + \frac{1 - \nu^2}{E} \left(\rho \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} + c \frac{\partial w}{\partial t} + \frac{\Delta p(x, y, t)}{h} \right) = 0, \quad (1)$$

© К. В. Аврамов, 2013

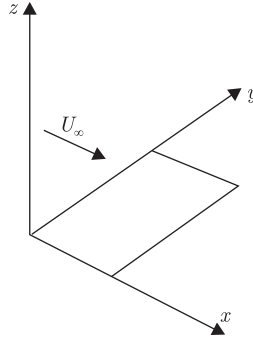


Рис. 1. Эскиз системы

где h — толщина пластинки; E, ν — модуль Юнга и коэффициент Пуассона; ρ — плотность материала пластинки; $\Delta p(x, y, t)$ — перепад давления на пластинке. Рассматривается консольная пластина, занимающая область $\Lambda = \{(x, y) \in [0, a] \times [0, b]\}$. Ее граничные условия таковы:

$$\begin{aligned}
 w(x, 0) &= \frac{\partial w(x, 0)}{\partial y} = 0, \\
 y = b; \quad Q_y + \frac{\partial M_{yx}}{\partial x} &= M_y = 0, \\
 x = 0, \quad x = a, \quad M_x = Q_x + \frac{\partial M_{xy}}{\partial y} &= 0,
 \end{aligned}$$

где Q_x, Q_y — поперечные силы; M_x, M_y, M_{xy} — изгибающие и крутящие моменты. Колебания пластинки разложим по собственным формам колебаний так:

$$w(x, y, t) = \sum_{j=1}^{N_1} q_j(t) \psi_j(x, y), \tag{2}$$

где $q_j(t)$ — обобщенные координаты; $\psi_j(x, y)$ — собственные формы колебаний.

Предположим, что на границе области устойчивости колебания пластинки близки к моногармоническим:

$$q_j(t) \approx \gamma_j \cos(\omega t) + \delta_j \sin(\omega t), \quad j = 1, \dots, N_1. \tag{3}$$

Предполагается, что пластинка обтекается потоком безвихревого, идеального, несжимаемого газа. На значительном удалении от пластинки поток движется с постоянной скоростью U_∞ вдоль оси x . Проекции скорости потока на координатные оси обозначим через $\tilde{u}(x, y, z, t); \tilde{v}(x, y, z, t); \tilde{w}(x, y, z, t)$. Параметры потока определяются потенциалом скоростей $\varphi(x, y, z, t)$ и функцией давления $p(x, y, z, t)$. Отметим, что потенциал скоростей и функция давления удовлетворяют уравнению Лапласа. Рассмотрим граничные условия для этого уравнения. Потенциал скоростей удовлетворяет условию Зоммерфельда: $\lim_{x^2+y^2+z^2 \rightarrow \infty} \text{grad } \varphi = 0$. На поверхности пластинки выполняется условие непротекания газа:

$$\left. \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right|_{z=0} = \frac{\partial w}{\partial t} + U_\infty \frac{\partial w}{\partial x}. \tag{4}$$

Вне пластинки на плоскости $z = 0$ и на ее границе перепад давлений равен нулю: $\Delta p|_{\partial S} = 0$, где $\Delta p(x, y, t)$ — перепад давления на пластинке; ∂S — граница рассматриваемой пластинки.

Возмущения в параметрах потока, вызванные колебаниями пластинки, выражаются через аэродинамические производные так [1]:

$$\varphi(x, y, z, t) = \sum_{j=1}^{N_1} [\varphi_j^{(0)}(x, y, z)q_j(t) + \varphi_j^{(1)}(x, y, z)\dot{q}_j(t)], \quad (5)$$

$$p(x, y, z, t) = \sum_{j=1}^{N_1} [p_j^{(0)}(x, y, z)q_j(t) + p_j^{(1)}(x, y, z)\dot{q}_j(t)]. \quad (6)$$

Заметим, что функции $\varphi_j^{(0)}(x, y, z)$, $\varphi_j^{(1)}(x, y, z)$, $p_j^{(0)}(x, y, z)$, $p_j^{(1)}(x, y, z)$ удовлетворяют уравнениям Лапласа:

$$\nabla^2 \varphi_j^{(k)} = 0, \quad \nabla^2 p_j^{(k)} = 0, \quad k = 0, 1, \quad j = 1, \dots, N_1. \quad (7)$$

Индекс j указывает номер формы колебаний, которая индуцирует перепад давления. Разложения (5), (6) введем в граничное условие (4). В результате получим граничные условия для первого уравнения из (7), которые не зависят от времени:

$$\left. \frac{\partial \varphi_j^{(0)}}{\partial z} \right|_{z=0} = U_\infty \frac{\partial \psi_j}{\partial x}, \quad \left. \frac{\partial \varphi_j^{(1)}}{\partial z} \right|_{z=0} = \psi_j. \quad (8)$$

Отметим, что для уравнений (7) выполняются все граничные условия, рассмотренные выше. Решение уравнения (7) представим таким образом [6]:

$$p_j^{(k)}(x, y, z) = \frac{1}{4\pi} \iint_S \Delta p_j^{(k)}(x_1, y_1) \left[\frac{\partial}{\partial z_1} \left(\frac{1}{r} \right) \right]_{z_1=0} dx_1 dy_1, \quad (9)$$

где $r = \sqrt{(x - x_1)^2 + (y - y_1)^2 + (z - z_1)^2}$; S — область, занимаемая срединной поверхностью пластинки; $\Delta p_j^{(k)}(x_1, y_1) = p_j^{(k)}(x_1, y_1, z_1)|_{z_1=0^+} - p_j^{(k)}(x_1, y_1, z_1)|_{z_1=0^-}$ — аэродинамические производные перепада давлений на поверхности пластинки; x_1, y_1, z_1 — переменные интегрирования. Значения аэродинамических производных давления предполагаются различными на сторонах пластинки и различными будут значения аэродинамических производных давления в верхнем и нижнем полупространстве.

Воспользуемся уравнением Бернулли

$$p(x, y, z) = -\rho_\infty \left(\frac{\partial \varphi(x, y, z)}{\partial t} + U_\infty \frac{\partial \varphi(x, y, z)}{\partial x} \right), \quad (10)$$

где ρ_∞ — плотность газа. Соотношения (5), (6) введем в уравнение (10) и воспользуемся предположением о моногармоническом характере колебаний пластинки (3), из которого следует $\ddot{q}_j = -\omega^2 q_j$. В результате получим следующую систему уравнений в частных производных:

$$U_\infty \frac{\partial \varphi_j^{(0)}}{\partial x} - \omega^2 \varphi_j^{(1)} = -\frac{p_j^{(0)}}{\rho_\infty}, \quad U_\infty \frac{\partial \varphi_j^{(1)}}{\partial x} + \varphi_j^{(0)} = -\frac{p_j^{(1)}}{\rho_\infty}. \quad (11)$$

Для решения системы (11) применим метод вариаций произвольных постоянных. Решение этой системы представим так:

$$\begin{aligned}\varphi_j^{(0)}(x, y, z) &= B_j^{(1)}(x, y, z) \exp\left(i\frac{\omega}{U_\infty}x\right) + B_j^{(2)}(x, y, z) \exp\left(-i\frac{\omega}{U_\infty}x\right), \\ \varphi_j^{(1)}(x, y, z) &= \frac{i}{\omega}B_j^{(1)}(x, y, z) \exp\left(i\frac{\omega}{U_\infty}x\right) - \frac{i}{\omega}B_j^{(2)}(x, y, z) \exp\left(-i\frac{\omega}{U_\infty}x\right),\end{aligned}\tag{12}$$

где i — мнимая единица. Соотношения (12) введем в (11), в результате получим:

$$\begin{aligned}2U_\infty\rho_\infty\frac{\partial B_j^{(1)}(x, y, z)}{\partial x} &= [i\omega p_j^{(1)}(x, y, z) - p_j^{(0)}(x, y, z)] \exp\left[-i\frac{\omega}{U_\infty}x\right], \\ 2U_\infty\rho_\infty\frac{\partial B_j^{(2)}(x, y, z)}{\partial x} &= -[i\omega p_j^{(1)}(x, y, z) + p_j^{(0)}(x, y, z)] \exp\left[i\frac{\omega}{U_\infty}x\right].\end{aligned}\tag{13}$$

Произведем интегрирование соотношений (13), используя условие Зоммерфельда. Результат введем в (12) и получим

$$\begin{aligned}\varphi_j^{(1)}(x, y, z) &= -\frac{1}{U_\infty\rho_\infty\omega} \times \\ &\times \int_{-\infty}^x \left[\omega p_j^{(1)}(\xi, y, z) \cos\left(\frac{\omega}{U_\infty}(\xi - x)\right) + p_j^{(0)}(\xi, y, z) \sin\left(\frac{\omega}{U_\infty}(\xi - x)\right) \right] d\xi, \\ \varphi_j^{(0)}(x, y, z) &= \frac{1}{U_\infty\rho_\infty} \times \\ &\times \int_{-\infty}^x \left[-p_j^{(0)}(\xi, y, z) \cos\left(\frac{\omega}{U_\infty}(\xi - x)\right) + \omega p_j^{(1)}(\xi, y, z) \sin\left(\frac{\omega}{U_\infty}(\xi - x)\right) \right] d\xi.\end{aligned}\tag{14}$$

Теперь решения (9) введем в уравнения (14), а результат подставим в (8). Получим следующую систему сингулярных интегральных уравнений:

$$\begin{aligned}4\pi U_\infty^2\rho_\infty\frac{\partial\psi_j(x, y)}{\partial x} &= -\omega \iint_S \Delta p_j^{(1)}(x_1, y_1) K_S(x - x_1, y - y_1) dx_1 dy_1 + \\ &+ \iint_S \Delta p_j^{(0)}(x_1, y_1) K_C(x - x_1, y - y_1) dx_1 dy_1, \\ 4\pi U_\infty\rho_\infty\omega\psi_j(x, y) &= \omega \iint_S \Delta p_j^{(1)}(x_1, y_1) K_C(x - x_1, y - y_1) dx_1 dy_1 + \\ &+ \iint_S \Delta p_j^{(0)}(x_1, y_1) K_S(x - x_1, y - y_1) dx_1 dy_1,\end{aligned}\tag{15}$$

где

$$\begin{aligned}
 K_C(x - x_1, y - y_1) &= - \int_{-\infty}^{x-x_1} \cos \frac{\omega(\lambda + x_1 - x)}{U_\infty} \frac{U_\infty}{[\lambda^2 + (y - y_1)^2]^{3/2}} d\lambda; \\
 K_S(x - x_1, y - y_1) &= - \int_{-\infty}^{x-x_1} \sin \frac{\omega(\lambda + x_1 - x)}{U_\infty} \frac{U_\infty}{[\lambda^2 + (y - y_1)^2]^{3/2}} d\lambda.
 \end{aligned}
 \tag{16}$$

Введем безразмерные переменные и параметры:

$$\begin{aligned}
 \chi &= \frac{\omega a}{U_\infty}; & \bar{\lambda} &= \frac{\lambda}{a}; & \bar{x}_1 &= \frac{x_1}{a}; & \bar{y}_1 &= \frac{y_1}{b}; & \bar{x} &= \frac{x}{a}; & \bar{y} &= \frac{y}{b}; \\
 r &= \frac{a}{b}; & \tau &= \omega t; & \vartheta_i &= \frac{q_i}{h}; & K_S &= \frac{a \bar{K}_S}{b^3}; & K_C &= \frac{a \bar{K}_C}{b^3}; \\
 \Delta \bar{p}_j^{(1)} &= \frac{\omega a \Delta p_j^{(1)}}{\rho_\infty U_\infty^2}; & \Delta \bar{p}_j^{(0)} &= \frac{a \Delta p_j^{(0)}}{\rho_\infty U_\infty^2},
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

где χ — число Струхалия. Система сингулярных интегральных уравнений (15) в безразмерных переменных принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
 \iint_{\bar{S}} \left[\Delta \bar{p}_j^{(1)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) \bar{K}_C(\bar{x} - \bar{x}_1, \bar{y} - \bar{y}_1) + \Delta \bar{p}_j^{(0)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) \bar{K}_S(\bar{x} - \bar{x}_1, \bar{y} - \bar{y}_1) \right] d\bar{x}_1 d\bar{y}_1 &= \\
 = \psi_j(\bar{x}, \bar{y}) \frac{4\pi\chi}{r^2}, \\
 \iint_{\bar{S}} \left[-\Delta \bar{p}_j^{(1)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) \bar{K}_S(\bar{x} - \bar{x}_1, \bar{y} - \bar{y}_1) + \Delta \bar{p}_j^{(0)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) \bar{K}_C(\bar{x} - \bar{x}_1, \bar{y} - \bar{y}_1) \right] d\bar{x}_1 d\bar{y}_1 &= \\
 = \frac{\partial \psi_j(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{x}} \frac{4\pi}{r^2}.
 \end{aligned}
 \tag{18}$$

Теперь уравнение (17) продифференцируем по \bar{x} и введем в уравнение (18). В результате получим следующее сингулярное интегральное уравнение:

$$\int \frac{\Delta \bar{p}_j^{(1)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) d\bar{x}_1 d\bar{y}_1}{[r^2(\bar{x} - \bar{x}_1)^2 + (\bar{y} - \bar{y}_1)^2]^{3/2}} = - \frac{8\pi\chi}{r^2} \frac{\partial \psi_j(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{x}}.
 \tag{19}$$

Продифференцируем уравнение (18) по \bar{x} и результат введем в (17). Получим следующее сингулярное интегральное уравнение:

$$\iint_{\bar{S}} \frac{\Delta \bar{p}_j^{(0)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1) d\bar{x}_1 d\bar{y}_1}{[r^2(\bar{x} - \bar{x}_1)^2 + (\bar{y} - \bar{y}_1)^2]^{3/2}} = \frac{4\pi}{r^2} \left[\chi^2 \psi_j(\bar{x}, \bar{y}) - \frac{\partial^2 \psi_j(\bar{x}, \bar{y})}{\partial \bar{x}^2} \right].
 \tag{20}$$

Итак, получена система сингулярных интегральных уравнений относительно аэродинамических производных (19), (20). Подчеркнем, что уравнения (20) не зависят от уравнений (19). Поэтому каждое из этих уравнений может решаться независимо. Эта система уравнений имеет достаточно простой вид и может быть решена с помощью классического метода дискретных вихрей [1].

Сингулярные интегральные уравнения (19), (20) решаются независимо. Численный метод их решения одинаков. Рассмотрим метод их решения на примере первого сингулярного интегрального уравнения (19). Пластинку разобьем на n вертикальных полос и N горизонтальных. В результате пластинка разбивается на nN прямоугольников. Вершины этих прямоугольников имеют следующие координаты: $x_k = kh_x$; $k = 1, \dots, n$; $y_p = ph_y$; $p = 1, \dots, N$. Область прямоугольника с номером $k + n(p-1)$ определим так: $S_{k+n(p-1)} = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x_{k-1} < x < x_k; y_{p-1} < y < y_p\}$. Центр тяжести этого прямоугольника обозначим через (ξ_k, η_p) . Размеры прямоугольников настолько малы, что функции $\Delta\bar{p}_j^{(1)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ и $\Delta\bar{p}_j^{(0)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ предполагаются имеющими постоянные значения на этом прямоугольнике. Предположим, что эти значения равняются значениям этих функций в центрах тяжести прямоугольников, которые обозначим так:

$$\Delta\bar{p}_{0,j}^{[k+n(p-1)]} = \Delta\bar{p}_j^{(0)}(\xi_k, \eta_p); \quad \Delta\bar{p}_{1,j}^{[k+n(p-1)]} = \Delta\bar{p}_j^{(1)}(\xi_k, \eta_p).$$

Интеграл в (19) представим в виде суммы интегралов по каждому из прямоугольников $S_{k+n(p-1)}$. На прямоугольниках функции $\Delta\bar{p}_j^{(1)}(\bar{x}_1, \bar{y}_1)$ являются постоянными и выйдут за знак интегрирования. Теперь точно удовлетворим уравнениям (19) в коллакационных точках (ξ_l, η_m) ; $l = 1, \dots, n$; $m = 1, \dots, N$. В результате получим систему линейных алгебраических уравнений относительно $\Delta\bar{p}_{1,j}^{[\mu]}$; $\mu = 1, \dots, nN$, которую представим таким образом:

$$\sum_{k=1}^n \sum_{p=1}^N A_{l+n(m-1), k+n(p-1)} \Delta\bar{p}_{1,j}^{[k+n(p-1)]} = -8\pi\chi \frac{\partial\psi_j(\bar{x}_l, \bar{y}_m)}{\partial\bar{x}}; \quad (21)$$

$$l = 1, \dots, n; \quad m = 1, \dots, N,$$

$$A_{l+n(m-1), k+n(p-1)} = \frac{\sqrt{(\eta_m - y_p)^2 + r^2(\xi_l - x_{k-1})^2}}{(\eta_m - y_p)(\xi_l - x_{k-1})} - \frac{\sqrt{(\eta_m - y_p)^2 + r^2(\xi_l - x_k)^2}}{(\eta_m - y_p)(\xi_l - x_k)} + \\ + \frac{\sqrt{(\eta_m - y_{p-1})^2 + r^2(\xi_l - x_k)^2}}{(\eta_m - y_{p-1})(\xi_l - x_k)} - \frac{\sqrt{(\eta_m - y_{p-1})^2 + r^2(\xi_l - x_{k-1})^2}}{(\eta_m - y_{p-1})(\xi_l - x_{k-1})}.$$

Итак, решение сингулярного интегрального уравнения (19) сведено к системе линейных алгебраических уравнений (21).

Соотношения (2) и (6) введем в (1) и применим метод Галеркина. В результате получим линейную динамическую систему относительно обобщенных координат q_1, q_2, \dots . Эта динамическая система относительно безразмерных переменных и параметров имеет вид

$$\sum_{j=1}^{N_1} R_{ij}(\chi^2 q_j'' + \alpha\chi^2 q_j' + \chi_1^2 \Omega_j^2 q_j) + \varepsilon \sum_{j=1}^{N_1} (A_{ij} q_j + B_{ij} q_j') = 0; \quad i = 1, \dots, N_1. \quad (22)$$

Параметры R_{ij} представляются в виде двойных интегралов с подинтегральными функциями в виде произведения форм колебаний. Коэффициенты A_{ij} и B_{ij} представляются в виде двойных интегралов, подинтегральные функции которых содержат аэродинамические производные (5), (6). Они определяются из решения системы линейных алгебраических уравнений (21).

Устойчивость положения равновесия пластины сводится к устойчивости тривиального состояния равновесия динамической системы (22). Для исследования устойчивости состояния равновесия системы (22) определим характеристические показатели.

Исследуем динамическую устойчивость консольной пластины. Сторона $x = 0$ закреплена, все остальные стороны свободны. На значительном удалении от пластинки поток газа движется с постоянной скоростью U_∞ вдоль оси x . Аэроупругость такой пластинки подробно исследовалась в работе [7]. Эта пластина имеет следующие численные значения параметров: $b = 0,127$; $r = 2,12$; $\rho_\infty = 1,43$ кг/м³; $\nu = 0,3$; $h = 0,39 \cdot 10^{-3}$ м; $E = 70,56 \cdot 10^9$ Па; $\rho = 2,84 \cdot 10^3$ кг/м³.

Для расчета собственных форм колебаний пластины $\psi_j(x, y)$ применяется метод Релея–Ритца. Исследуем потерю динамической устойчивости пластинки. Для этого определяется скорость потока U_∞ , соответствующая бифуркации Хопфа. Более того, определяется частота колебаний, соответствующая этой скорости, ω . В численных расчетах число степеней свободы системы (22) принимается $N_1 = 6$. Была найдена численно критическая скорость потока U_∞ и частота колебаний пластинки ω , соответствующая этой скорости, $U_\infty = 30,52$ м/с; $\omega = 124$ рад/с. Значения этих же параметров опубликовано в [7]: $U_\infty = 29,5$ м/с; $\omega = 141,3$ рад/с. Итак, значения, представленные здесь и в работе [7], близки.

Таким образом, в данной работе предложен новый подход к исследованию аэроупругих колебаний пластин. В основном, для исследования аэроупругих колебаний применяются гиперсингулярные интегральные уравнения относительно плотности циркуляции. При использовании этих уравнений приходится учитывать след, сходящийся с задней кромки пластинки. В этом случае изучается длительный переходный процесс и не удается исследовать устойчивость состояния равновесия расчетом характеристических показателей. Также предлагается другой подход, который основывается на гиперсингулярных интегральных уравнениях относительно аэродинамических производных перепада давления. Тогда нет необходимости учитывать след, сходящийся с задней поверхности пластинки, и удастся исследовать потерю устойчивости равновесного состояния пластинки расчетом характеристических показателей.

1. Белоцерковский С. М., Скрипач Б. К. Аэродинамические производные летательного аппарата и крыла при дозвуковых скоростях. – Москва: Наука, 1975. – 424 с.
2. Воробьев Н. Ф. Аэродинамика несущих поверхностей в установившемся потоке. – Новосибирск: Наука, 1985. – 236 с.
3. Горелов Д. Н., Курзин В. Б., Сарен В. Е. Аэродинамика решеток в нестационарном потоке. – Новосибирск: Наука, 1972. – 320 с.
4. Бреславский И. Д., Стрельникова Е. А., Аврамов К. В. Свободные колебания пологой оболочки при геометрически нелинейном деформировании в жидкости // Пробл. прочности. – 2011. – № 1. – С. 40–50.
5. Аврамов К. В., Стрельникова Е. А., Киреевков А. А. Автоколебания пластины, взаимодействующей с потоком жидкости // Прикл. гидромеханика. – 2011. – № 1. – С. 42–47.
6. Dowell E. H., Curtiss H. C., Scanlan R. H., Sisto F. A modern course in aeroelasticity. – Dordrecht: Kluwer, 1995. – 600 p.

7. Tang D. M., Yamamoto H., Dowell E. H. Flutter and limit cycle oscillations of two-dimensional panels in three-dimensional axial flow // J. of Fluids and Structures. – 2003. – No 17. – P. 225–242.

*Институт проблем машиностроения
им. А. Н. Подгорного НАН Украины, Харьков*

*Поступило в редакцию 25.06.2012
После доработки – 25.02.2013*

К. В. Аврамов

До аероупружної взаємодії пластин з безвихровим ідеальним газовим потоком

Пропонується метод дослідження динамічної взаємодії пластин з течією ідеального газу, що не стискається. Отримано систему сингулярних інтегральних рівнянь відносно перепаду тиску, яка використовується для розв'язання задач аероупружності пластин. Розроблено числову процедуру розв'язання отриманої системи сингулярних інтегральних рівнянь.

K. V. Avramov

Aeroelastic interaction of plates with a three-dimensional inviscid potential gas flow

The method to analyze the dynamic interaction of plates with a three-dimensional inviscid potential gas flow is suggested. The system of singular integral equations with respect to the pressure is suggested. This system is used to study aeroelasticity. A numerical approach to the solution of singular integral equations is suggested.

Аналог решения Стеклова в задаче о движении тяжелого гиростата с переменным гиростатическим моментом

(Представлено академиком НАН Украины А. М. Ковалевым)

Рассмотрена задача о вращении вокруг неподвижной точки тяжелого гиростата с переменным гиростатическим моментом. Получено точное решение уравнений движения с квадратичным по компонентам угловой скорости инвариантным соотношением. В случае постоянства гиростатического момента найденное решение соответствует четвертому решению Харламова, а при отсутствии гиростатического момента вырождается в решение Стеклова. Указаны условия, при которых сохраняется характерное для решения Стеклова свойство изоконичности движения.

Рассмотрим механическую систему, состоящую из тела-носителя S , имеющего неподвижную точку, и закрепленных на нем тел S^i , $i = 1, 2, \dots, n$. Пусть система $\{S, S^1, \dots, S^n\}$ удовлетворяет определению гиростата [2–4]. В этом случае динамические характеристики носителя не зависят от вращения присоединенных тел, а уравнения движения во вращающемся вместе с телом S базисе имеют вид

$$J\dot{\omega} + \dot{\lambda} = (J\omega + \lambda) \times \omega + \Gamma(e \times \nu), \quad \dot{\nu} = \nu \times \omega, \quad (1)$$

где ω — угловая скорость гиростата; ν — орт нисходящей вертикали; λ — гиростатический момент; J — обобщенный тензор инерции; Γ — вес гиростата; e — радиус-вектор центра масс. При постоянном λ известны три первых интеграла уравнений движения, но при $\lambda = \lambda(t)$ система (1) допускает только два из них:

$$(J\omega + \lambda, \nu) = g, \quad |\nu|^2 = 1. \quad (2)$$

Предположим, что направление переменного гиростатического момента фиксировано во вращающемся базисе: $\lambda = \lambda(t)\alpha$, $|\alpha| = 1$, где $\lambda(t)$ — непрерывно дифференцируемая ограниченная функция времени. Примером такого гиростата будет твердое тело с маховиком, ось собственного вращения которого жестко закреплена в корпусе носителя, а его скоростью собственного вращения можно управлять [5].

При $\lambda = \lambda(t)\alpha$ изучены основные классы движений тяжелого гиростата, получены аналоги интегрируемых случаев Лагранжа, Гесса, Бобылева–Стеклова, Гриоли, Харламовой (см. [5–10]). В настоящей работе представлено новое решение, обобщающее решение Харламова [11], [3, с. 169]. Положив в нем $\lambda(t) = 0$, получим классический интегрируемый случай Стеклова.

Исходные предположения. Решение Стеклова [1] уравнений движения твердого тела получено при условии, что центр масс принадлежит главной оси. В решении Харламова, обобщающем этот результат на задачу о движении гиростата [11], вдоль той же главной оси

направлен и постоянный вектор λ . В случае $\lambda = \lambda(t)$ примем аналогичные предположения: $\lambda(t) \parallel \alpha \parallel e \parallel i_1 \parallel Ji_1$. Будем также считать, что $|e| = 1$, $\Gamma = 1$, поскольку при $\Gamma|e| \neq 0$ этого всегда можно добиться введением безразмерных величин.

В работе [1] В. А. Стеклов нашел такие значения параметров n и m , при которых существует решение уравнений движения с соотношениями

$$\nu_2 = n\omega_1\omega_2, \quad \nu_3 = m\omega_1\omega_3. \quad (3)$$

Он показал, что из (3) следует дополнительное, квадратичное по компонентам угловой скорости ω , инвариантное соотношение. П. В. Харламов усложнил структуру исходных инвариантных соотношений: в [11] получено решение, для которого выполняется

$$\nu_2 = (n\omega_1 + n_*\lambda)\omega_2, \quad \nu_3 = (m\omega_1 + m_*\lambda)\omega_3, \quad (4)$$

где λ — произвольная постоянная, а m, n, m_*, n_* выражены через главные моменты инерции.

Для уравнений (1) движения *неавтономного* гиростата инвариантные соотношения также зададим в виде (4). Зависимость величины λ от ω положим линейной:

$$\lambda = \varkappa(\omega, \alpha) + \text{const} = \varkappa\omega_1 + \lambda_0; \quad (5)$$

теперь соотношения (4) можно записать в виде

$$\nu_2 = (\tilde{n}\omega_1 + n_*\lambda_0)\omega_2, \quad \nu_3 = (\tilde{m}\omega_1 + m_*\lambda_0)\omega_3. \quad (6)$$

Аналог решения Харламова. Выпишем решение с инвариантными соотношениями (6) для системы (1), дополненной условием (5). Дважды продифференцируем (6) в силу системы и в полученных выражениях снова учтем равенства (6). В результате будем иметь условия вида $\omega_2\omega_3(a_i\omega_1 + b_i) = 0$, $i = 1, 2$. Поскольку решения с линейными по ω инвариантными соотношениями здесь не рассматриваются, потребуем выполнения $a_i = b_i = 0$, $i = 1, 2$. Эти условия позволяют выразить $\tilde{m}, \tilde{n}, m_*, n_*$ через J_1, J_2, J_3 и величину $\varkappa + J_1 = L$:

$$\tilde{n} = \frac{(L - J_2)(L - J_3)}{(2J_3 - L)}, \quad \tilde{m} = \frac{(L - J_2)(L - J_3)}{(2J_2 - L)}, \quad (7)$$

$$n_* = \frac{L^3 - 2(J_2 + 2J_3)L^2 + (8J_2 + 3J_3)J_3L - J_2J_3(J_2 + 5J_3)}{(2J_2 - L)(2J_3 - L)^2}, \quad (8)$$

$$m_* = \frac{L^3 - 2(2J_2 + J_3)L^2 + (3J_2 + 8J_3)J_2L - J_2J_3(5J_2 + J_3)}{(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)}.$$

Очевидно, что условия (7) при $L = J_1$ ($\varkappa = 0$) совпадают с условиями Стеклова [1]. То есть $\lambda(t) \neq \text{const}$, только когда условия Стеклова *не выполняются*. С учетом соотношений (6) и выражений (7), (8) динамические уравнения упрощаются и принимают форму, аналогичную [11]:

$$\begin{aligned} L\dot{\omega}_1 &= (J_2 - J_3)\omega_2\omega_3, \\ \dot{\omega}_2 &= \omega_3 \left[\frac{(J_3 - L)}{(2J_2 - L)}\omega_1 + \lambda_0 \frac{J_2(L - 3J_3) + J_3^2}{(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)} \right], \\ \dot{\omega}_3 &= \omega_2 \left[\frac{(L - J_2)}{(2J_3 - L)}\omega_1 - \lambda_0 \frac{J_3(L - 3J_2) + J_2^2}{(2J_2 - L)(2J_3 - L)^2} \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Дополнительное условие $J_2 = J_3$ приводит к случаю Лагранжа, который тривиальным образом обобщается на задачу о движении неавтономного гиростата. Далее считаем, что $J_2 \neq J_3$ и, следовательно, $L \neq 0$. Уравнения (9) позволяют выразить $\omega_2(\omega_1)$ и $\omega_3(\omega_1)$:

$$(J_2 - J_3)\omega_2^2 = \frac{L(J_3 - L)}{(2J_2 - L)}\omega_1^2 + \frac{2\lambda_0 L[J_2(L - 3J_3) + J_3^2]}{(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)}\omega_1 + h_2, \quad (10)$$

$$(J_2 - J_3)\omega_3^2 = \frac{L(L - J_2)}{(2J_3 - L)}\omega_1^2 - \frac{2\lambda_0 L[J_3(L - 3J_2) + J_2^2]}{(2J_2 - L)(2J_3 - L)^2}\omega_1 + h_3. \quad (11)$$

Константы h_2 , h_3 связаны равенством

$$[(L - 2J_2)h_2 + (L - 2J_3)h_3] = \frac{G\lambda_0^2 L(J_2 - J_3)}{(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)^2}, \quad (12)$$

$$G = L^4 - 3(J_2 + J_3)L^3 + [4(J_2^2 + J_3^2) + 5J_2J_3]L^2 - 3(J_2 + J_3)(J_2^2 + J_3^2)L + J_2J_3[5(J_2^2 + J_3^2) - 6J_2J_3],$$

которое было получено исключением ν_1 из первых производных соотношений (6) в силу системы (1). В первую очередь рассмотрим возможность $L = J_2$: принятые допущения приводят к $G(J_2) = J_2(2J_3 - J_2)(J_2 - J_3)^2 \neq 0$, поэтому правая часть (12) может обращаться в нуль только при $\lambda_0 = 0$. Но тогда из (6) получаем $\nu_2 = \nu_3 = 0$, т. е. $\boldsymbol{\nu}$ — постоянный вектор и $\boldsymbol{\nu} \parallel \boldsymbol{\omega}$. Вращения вокруг неподвижной оси мы здесь не рассматриваем, поэтому везде далее полагаем $(J_2 - L)(J_3 - L) \neq 0$.

Из кинематических уравнений системы (1) с учетом (6), (10), (11) получим $\nu_1(\omega_1)$:

$$\begin{aligned} \nu_1 = & \frac{(J_2 - L)(J_3 - L)L}{(2J_2 - L)(2J_3 - L)}\omega_1^2 - \lambda_0 L \frac{(J_2 + J_3)(L^2 + 2J_2J_3) - 6J_2J_3L}{(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)^2}\omega_1 + \\ & + \frac{(J_2 - L)(J_3 - L)}{(2J_2 - L)L}h_3 + \\ & + \frac{[L^3 - 2(2J_2 + J_3)L^2 + J_2(3J_2 + 8J_3)L - J_2J_3(5J_2 + J_3)][J_2(3J_3 - J_2) - J_3L]}{(2J_2 - L)^3(2J_3 - L)^3}\lambda_0^2. \end{aligned} \quad (13)$$

Теперь, приравняв единице постоянную в левой части интеграла $|\boldsymbol{\nu}|^2 = 1$, определим зависимость h_2 от L , λ_0 и главных моментов инерции:

$$\begin{aligned} [h_2(J_2 - L)^2(J_3 - L)^2(2J_2 - L)^3(2J_3 - L)^2 + \lambda_0^2 L P_7(L)]^2 = & \frac{1}{4}\lambda_0^4 L^3(2J_3 - L)^2 \times \\ & \times (2J_2 - L)^2(J_2 - J_3)^2(J_2 + J_3 - 2L)[2(L^2 + 2J_2J_3) - 3L(J_2 + J_3)]^3 + \\ & + L^2(J_2 - L)^2(J_3 - L)^2(2J_2 - L)^6(2J_3 - L)^6, \end{aligned} \quad (14)$$

где

$$\begin{aligned} P_7(L) = & -L^7 + (6J_2 + 5J_3)L^6 - (11J_2^2 + 7J_3^2 + 32J_2J_3)L^5 + \\ & + \frac{1}{2}[13J_2^3 - J_3^3 + J_2J_3(121J_2 + 111J_3)]L^4 - J_3[37J_2^3 - 7J_3^3 + (114J_2 + 29J_3)J_2J_3]L^3 + \end{aligned}$$

$$+ J_3[J_2^4 - 3J_3^4 + J_2J_3(73J_2^2 - 11J_3^2 + 83J_2J_3)]L^2 - \\ - J_2J_3^2[3J_2^3 - 8J_3^3 + 3J_2J_3(20J_2 + 3J_3)]L + J_2^2J_3^3(J_2 + 5J_3)(3J_2 - J_3).$$

Таким образом, формулы (10), (11), (13) и соотношения (6) задают зависимости $\omega_2, \omega_3, \nu_1, \nu_2, \nu_3$ от ω_1 . Первое уравнение редуцированной системы (9) позволяет определить $\omega_1(t)$. Если параметры удовлетворяют соотношениям (7), (8), (12), (14), то полученное решение удовлетворит исходной системе дифференциальных уравнений (1).

Изоконичность движения гиростата. Движение твердого тела, соответствующее классическому интегрируемому случаю Стеклова, детально исследовано в [12]. Известно, что оно обладает свойством *изоконичности*

$$\exists \xi, \gamma: (\omega, \xi) = (\omega, \gamma), \quad \dot{\xi} = 0, \quad \dot{\gamma} = \gamma \times \omega, \quad |\xi| = |\gamma| = 1, \quad (15)$$

которое впервые было отмечено в работе П. Филда [13]. Условие (15) означает, что подвижный и неподвижный аксоиды симметричны относительно касательной к ним плоскости. В случае Стеклова вектор ξ коллинеарен барицентрической оси, а γ направлен вдоль вертикали ν . Проверим, сохраняется ли свойство изоконичности, если $\lambda(t)$ имеет вид (5). Скалярное произведение $(\omega, \nu - \xi)$ при $\xi = \pm e$ представляет собой квадратичное по ω_1 выражение, старший коэффициент которого равен

$$L^2(2J_2 - L)^2(2J_3 - L)^2(J_2 - L)^2(J_3 - L)^2(J_2 + J_3 - L)\lambda_0. \quad (16)$$

Выражение (16) может принимать нулевое значение только в случаях а) $J_2 + J_3 = L$; б) $\lambda_0 = 0$.

а) $J_2 + J_3 = L$: коэффициент при ω_1 и свободный член в $(\omega, \nu - \xi)$ исчезают только при одновременном выполнении условий

$$J_2(J_3 - J_2)h_2 = (J_2 + J_3)\lambda_0^2, \quad J_2(J_3 - J_2)h_2 + J_3^{-1}(J_2 - J_3)^2(J_2 + J_3)\xi_1 = (J_2 + J_3)\lambda_0^2,$$

которые приводят к невозможному при $J_3 \neq J_2, \xi_1 = \pm 1$ равенству $(J_2 - J_3)^2(J_2 + J_3)\xi_1 = 0$. Следовательно, движение гиростата с такими параметрами изоконическим не является;

б) $\lambda_0 = 0$: в этом случае равенство нулю коэффициента при ω_1 в $(\omega, \nu - \xi)$ равносильно условию $(J_2 - L)(J_3 - L)h_2 + \xi_1 L(L - 2J_3) = 0$, которое обращает (15) в тождество. Свободного члена по ω_1 выражение $(\omega, \nu - \xi)$ не содержит. Следовательно, соответствующее найденному решению движение гиростата с $\lambda = \kappa\omega_1(t)\alpha$ будет *изоконическим*.

Зависимость от времени компонент ω, ν при $\lambda_0 = 0$. В случае $\lambda = \text{const}$ зависимость основных переменных от времени для решения Стеклова — Харламова получена Г. В. Мозалевской [14]. При $\lambda = \kappa\omega_1(t) + \lambda_0$ ограничимся случаем $\lambda_0 = 0$, соответствующим классическому решению Стеклова: выпишем в явном виде $\omega(t)$. Поскольку возможность $J_2 = J_3$ исключена из рассмотрения, положим $J_2 > J_3$.

Эллиптическая функция $\omega_1(t)$ определяется интегрированием уравнения

$$L\dot{\omega}_1 = \pm \sqrt{\frac{L(J_3 - L)}{(2J_2 - L)}\omega_1^2 + h_2} \sqrt{\frac{L(L - J_2)}{(2J_3 - L)}\omega_1^2 + h_3}. \quad (17)$$

При $\lambda_0 = 0$ из (12), (14) получаем $h_3 = \frac{h_2(L - 2J_2)}{(2J_3 - L)}$, $|h_2| = \left| \frac{L(2J_3 - L)}{(J_2 - L)(J_3 - L)} \right|$, причем знак h_2 выбираем так, чтобы правые части равенств (10), (11) одновременно были положительными.

В классическом интегрируемом случае Стеклова возможны два различных типа решения уравнения (17). Первый выписан самим В. А. Стекловым; условия существования второго указаны Р. Фаббри в работе [15]. Но при $\lambda \neq 0$ вариантов решения уже четыре:

1) $L \in (2J_3; J_2)$, $J_2 > 2J_3$: $\omega_1 = p \operatorname{cn}(u, k)$, $\omega_2 = q \operatorname{sn}(u, k)$, $\omega_3 = r \operatorname{dn}(u, k)$, где

$$p^2 = \frac{(L - 2J_3)(2J_2 - L)}{(L - J_3)^2(J_2 - L)}, \quad q^2 = \frac{L(L - 2J_3)}{(J_2 - J_3)(L - J_3)(J_2 - L)}, \quad r^2 = \frac{L(2J_2 - L)}{(L - J_3)^2(J_2 - L)},$$

$$u^2 = \frac{(J_2 - J_3)(t - t_0)^2}{(L - J_3)(J_2 - L)}, \quad k = \sqrt{\frac{J_2 - L}{J_2 - J_3}} < \sqrt{1 - \frac{J_3}{J_2 - J_3}} < 1;$$

2) $L \in (\max\{J_2, 2J_3\}; 2J_2)$: $\omega_1 = p \operatorname{sn}(u, k)$, $\omega_2 = q \operatorname{cn}(u, k)$, $\omega_3 = r \operatorname{dn}(u, k)$,

$$p^2 = \frac{(L - 2J_3)(2J_2 - L)}{(L - J_3)^2(L - J_2)}, \quad q^2 = \frac{L(L - 2J_3)}{(J_2 - J_3)(L - J_3)(L - J_2)}, \quad r^2 = \frac{L(2J_2 - L)}{(J_2 - J_3)(L - J_3)(L - J_2)},$$

$$u^2 = \frac{(t - t_0)^2}{L - J_2}, \quad k = \sqrt{\frac{L - J_2}{L - J_3}} < \sqrt{1 - \frac{J_2 - J_3}{2J_2 - J_3}} < 1;$$

3) $L \in (-\infty; 0)$: $\omega_1 = p \operatorname{dn}(u, k)$, $\omega_2 = q \operatorname{sn}(u, k)$, $\omega_3 = r \operatorname{cn}(u, k)$,

$$p^2 = \frac{(2J_3 - L)(2J_2 - L)}{(L - J_3)^2(J_2 - L)}, \quad q^2 = \frac{L(L - 2J_3)}{(L - J_2)^2(J_3 - L)}, \quad r^2 = \frac{L(L - 2J_2)}{(L - J_3)^2(J_2 - L)},$$

$$u^2 = \frac{(t - t_0)^2}{J_3 - L}, \quad k = \sqrt{\frac{J_2 - J_3}{J_2 - L}} < \sqrt{1 - \frac{J_3}{J_2}} < 1;$$

4) $L \in (2J_2; +\infty)$: $\omega_1 = p \operatorname{dn}(u, k)$, $\omega_2 = q \operatorname{cn}(u, k)$, $\omega_3 = r \operatorname{sn}(u, k)$,

$$p^2 = \frac{(2J_3 - L)(2J_2 - L)}{(L - J_2)^2(L - J_3)}, \quad q^2 = \frac{L(L - 2J_3)}{(L - J_2)^2(L - J_3)}, \quad r^2 = \frac{L(L - 2J_2)}{(L - J_3)^2(L - J_2)},$$

$$u^2 = \frac{(t - t_0)^2}{L - J_2}, \quad k = \sqrt{\frac{J_2 - J_3}{L - J_3}} < \sqrt{1 - \frac{J_2}{2J_2 - J_3}} < 1.$$

В отличие от случая Стеклова, в котором действительные решения уравнения (17) существуют только при $2J_3 < J_1 < 2J_2$, условия 2–4 существования обобщенного решения вообще не накладывают ограничений на распределение масс гиростата. Отметим, что последние два условия при $\lambda = \operatorname{const}$ не выполнимы: в 3 получаем $J_1 < 0$, а в 4 моменты инерции не удовлетворяют неравенствам треугольника. Таким образом, решения 3, 4 системы уравнений (1) являются новыми и не имеют аналогов в классической задаче о движении твердого тела.

Работа выполнена при финансовой поддержке НАН Украины и РФФИ (рег. № 0112U003346).

1. Стеклов В. А. Новое частное решение дифференциальных уравнений движения тяжелого твердого тела, имеющего неподвижную точку // Тр. Отд. физ. наук Об-ва любителей естествознания. – 1899. – 10, вып. 1. – С. 1–3.
2. Харламов П. В. Гиростаты // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1988. – № 9. – С. 38–41.
3. Горр Г. В., Кудряшова Л. В., Степанова Л. А. Классические задачи динамики твердого тела. Развитие и современное состояние. – Киев: Наук. думка, 1978. – 296 с.
4. Гашененко И. Н., Горр Г. В., Ковалев А. М. Классические задачи динамики твердого тела. – Киев: Наук. думка, 2012. – 402 с.

5. *Kovaleva L. M.* Investigation of permanent rotations of the rigid body with fixed point, carrying one- and two-degree gyros // XXII Yugoslav congress of theoret. and appl. mechanics. – Vrnjaska Banja, 1997. – P. 61–64.
6. *Волкова О. С.* Деякі класи рухів важкого гіростата зі змінним гіростатичним моментом: Автореф. дис. ... канд. фіз.-мат. наук: 01.02.01. ИПММ НАН України. – Донецьк, 2010. – 19 с.
7. *Волкова О. С., Гашененко И. Н.* Точные решения уравнений движения гиростата вокруг неподвижной точки // Современ. проблемы математики, механики, информатики / Под ред. Н. Н. Кизиловой, Г. Н. Жолткевича. – Харьков: Апостроф, 2011. – С. 74–84.
8. *Волкова О. С.* Инвариантное соотношение уравнений движения тяжелого гиростата в случае, когда центр масс принадлежит главной плоскости // Механика тв. тела. – 2012. – **42**. – С. 76–83.
9. *Волкова О. С., Гашененко И. Н.* Аналог решения Гесса в обобщенной задаче о движении гиростата // Тез. докл. междунар. конф. “Актуальные проблемы прикладной математики, информатики и механики”. – Воронеж, 2012. – Ч. 2. – С. 68–72.
10. *Горр Г. В., Мазнев А. В.* О некоторых классах регулярной прецессии гиростата с переменным гиростатическим моментом относительно наклонной оси в обобщенной задаче динамики // Тр. ИПММ НАН Украины. – 2010. – **21**. – С. 64–75.
11. *Харламов П. В.* Лекции по динамике твердого тела. – Новосибирск: Изд-во Новосибир. ун-та, 1965. – 221 с.
12. *Харламова Е. И., Мозалевская Г. В.* Исследование решения В. А. Стеклова уравнений движения тела, имеющего неподвижную точку // Мат. физика. – 1968. – Вып. 5. – С. 194–202.
13. *Field P.* On the unsymmetrical top // Acta Math. – 1931. – **56**. – P. 355–362; – 1934. – **62**. – P. 313–316.
14. *Мозалевская Г. В.* Зависимость от времени основных переменных задачи о движении тела, имеющего неподвижную точку // Механика тв. тела. – 1972. – Вып. 4. – С. 25–35.
15. *Fabrizi R.* Sopra un particolare movimento di un solido pesante intorno a un punto fisso // Rend. Acc. Naz. dei Lincei. – 1934. – Ser. 6, **19**. – P. 38–41.

*Институт прикладной математики
и механики НАН Украины, Донецк*

Поступило в редакцию 22.02.2013

О. С. Волкова

Аналог розв’язку Стеклова в задачі про рух важкого гіростата зі змінним гіростатичним моментом

Розглянуто задачу про обертання навколо нерухомої точки важкого гіростата зі змінним гіростатичним моментом. Одержано точний розв’язок рівнянь руху, який допускає квадратичне за кутовою швидкістю інваріантне співвідношення. У випадку сталості гіростатичного моменту цей розв’язок відповідає четвертому розв’язку Харламова, а при відсутності гіростатичного моменту збігається з розв’язком Стеклова. Вказано умови, при яких зберігається характерна для розв’язку Стеклова властивість ізоконічності руху.

O. S. Volkova

An analog for Steklov’s solution to the problem of motion of a heavy gyrostat with variable gyrostatic momentum

Rotations about a fixed point are studied for a heavy gyrostat with variable gyrostatic momentum. The exact particular solution that admits the invariant relation quadratic in the angular velocity is obtained for the motion equations. If the gyrostatic momentum is a constant vector, the solution corresponds to the fourth Kharlamov solution. In the case of zero gyrostatic momentum, it becomes the known Steklov solution. The conditions for the isoconic property of a gyrostat motion to hold are studied.

Член-корреспондент НАН Украины Л. П. Хорошун

Гидродинамическая теория экспериментального определения скорости эфирного ветра на основе эффекта первого порядка

Построены уравнения нестационарного осредненного течения вязкой жидкости в цилиндрической трубе, находящейся в равномерно движущемся потоке. Исследованы решения для неподвижной трубы и при ее повороте в случае ламинарного и турбулентного течений. Решены задачи по определению скорости и кинематической вязкости эфира по измеренным смещениям полос статической и динамической интерференционной картины в модифицированной установке Хека.

Неинвариантность уравнений Максвелла относительно преобразований Галилея и нулевые, как принято считать, результаты первых опытов Майкельсона по измерению скорости эфирного ветра, обусловленного орбитальным движением Земли, явились, по существу, причиной отказа в физике от понятия “материальный эфир”. Его заменили специальной теорией относительности (СТО), базирующейся на двух постулатах Эйнштейна: 1) инвариантность всех физических законов и уравнений относительно преобразований Лоренца, сохраняющих инвариантность уравнений Максвелла; 2) независимость скорости распространения света от скоростей движения инерциальных систем отсчета, относительно которых скорость света измеряется. Несмотря на антилогичность второго постулата, а также явное фиксирование эфирного ветра в экспериментах Миллера, Майкельсона, Писа и Пирсона в 1921–1929 годы [1, 2], СТО заняла официальный статус в физике. В сложившейся парадоксальной ситуации необходимыми стали новые научные разработки, подтверждающие существование эфира. Одной из таких работ стало построение [3] общих динамических уравнений электромагнетизма диэлектриков, инвариантных относительно преобразований Галилея, из которых для неподвижных диэлектриков как частный случай следуют уравнения Максвелла. Это свидетельствует о неправомерности введения преобразований Лоренца, а тем более их распространения на все физические законы и уравнения, а также о справедливости и логичности классического правила сложения скоростей.

Убедительным подтверждением существования эфира могли бы стать, наряду с опытом Физо и явлением звездной aberrации, новые эксперименты на основе эффектов первого порядка, точность и достоверность которых на порядок превосходит эксперименты на основе эффектов второго порядка, проведенные Миллером, Майкельсоном, Писом и Пирсоном. Такие эксперименты могут быть осуществлены с помощью модифицированной установки Хека [4] на основе интерферометра Саньяка [5], особенно в динамическом режиме, когда смещение полос интерферометра существенно возрастает. При этом расшифровка экспериментальных измерений смещений интерференционных полос связана с необходимостью точного решения определенных задач гидродинамики. Результаты подобных опытов приведены в работах Галаева [6, 7]. Однако для расшифровки измерений здесь ошибочно принято решение задачи Громеки [8], неприменимой к рассматриваемым процессам, а также допущено ряд неправомерных манипуляций, свидетельствующих о подтасовке под результаты

Миллера. Это не дает оснований считать достоверными приведенные значения скорости движения эфира и его кинематической вязкости вблизи земной поверхности.

Настоящая работа посвящена построению и решению уравнений нестационарного осредненного течения вязкой жидкости в цилиндрической трубе, находящейся в равномерно движущемся потоке, а также решению конкретных задач по определению скорости и кинематической вязкости движущегося эфира по измеренным смещениям полос статической и динамической интерференционной картины в модифицированной установке Хека.

Нестационарное течение вязкой жидкости в цилиндрической трубе, находящейся в равномерно движущемся потоке. Пусть в равномерно движущемся неограниченном потоке вязкой несжимаемой жидкости находится длинная цилиндрическая труба, ориентация которой относительно потока может изменяться во времени при заданной начальной скорости. Это приводит к нестационарному течению вязкой жидкости в трубе, которое может быть ламинарным или турбулентным в зависимости от числа Рейнольдса. Поэтому будем исходить из уравнений Рейнольдса [8], представляющих собой осредненные уравнения Навье–Стокса для турбулентного течения,

$$\rho \frac{d\bar{v}_i}{dt} = \rho \bar{F}_i - \bar{p}_{,i} + S_{ij,j}, \quad S_{ij} = \bar{\tau}_{ij} - \rho \overline{v'_i v'_j}, \quad (1)$$

где $v_i, v'_i = v_i - \bar{v}_i, F_i$ — векторы соответственно скорости, пульсаций скорости и объемных сил; τ_{ij} — тензор напряжений, обусловленных вязкостью; p — давление; ρ — плотность (черта сверху означает сглаживающее осреднение). Если пульсации гидродинамических параметров равны нулю, то уравнение (1) описывает ламинарное течение.

Рассмотрим осесимметричное нестационарное течение вязкой несжимаемой жидкости в трубе длиной l и внутренним радиусом a ($l \gg a$) в цилиндрической системе координат r, φ, z при отсутствии объемных сил, где ось z проходит по осевой линии трубы. В этом случае [8] имеем

$$\bar{v}_r = \bar{v}_\varphi = 0, \quad \frac{\partial \bar{v}_z}{\partial z} = 0, \quad \bar{v}_z = \bar{v}(r, \varphi, t), \quad \frac{\partial \bar{p}}{\partial r} = 0, \quad \frac{\partial \bar{p}}{\partial \varphi} = 0, \quad (2)$$

и уравнения (1) сводятся к одному уравнению

$$\rho \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r S_{rz}). \quad (3)$$

В ряде практических задач о течении вязкой жидкости в трубе интерес представляет средняя по сечению скорость или расход жидкости, являющийся интегральной характеристикой по сечению трубы. В этом случае целесообразно упростить уравнение (3), осреднив его по сечению трубы согласно формулам

$$\bar{v} = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a 2\pi r \bar{v} dr; \quad \bar{p} = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a 2\pi r \bar{p} dr; \quad \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a 2\pi \frac{\partial}{\partial r} (r S_{rz}) dr = \frac{2}{a} S_{rz}(a), \quad (4)$$

в результате чего получим

$$\rho \frac{\partial \bar{v}}{\partial t} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{2}{a} S_{rz}(a). \quad (5)$$

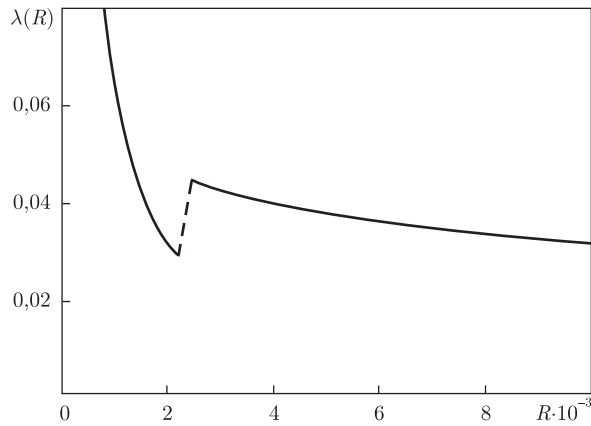


Рис. 1

Здесь $S_{rz}(a)$ — максимальное значение касательных напряжений, действующих на жидкость со стороны трубы, которое как при ламинарном, так и при турбулентном течении определяется [8, 9] формулой

$$S_{rz}(a) = -\frac{1}{8}\lambda\rho\tilde{v}^2, \quad (6)$$

где λ — коэффициент сопротивления трубы.

Известно [8, 9], что в случае ламинарного и турбулентного течений жидкости в трубе коэффициент сопротивления λ связан с числом Рейнольдса R соответственно зависимостями Пуазейля и Блазиуса

$$\lambda = \frac{64}{R}, \quad \lambda = \frac{0,3164}{R^{0,25}} \quad \left(R = \frac{2a\tilde{v}}{\nu}, \quad \nu = \frac{\mu}{\rho} \right), \quad (7)$$

где μ, ν — коэффициенты, соответственно, динамической и кинематической вязкости жидкости.

При изменении числа Рейнольдса от малых до очень больших значений коэффициент сопротивления трубы λ , согласно (7) и данным экспериментов [8], можно представить графиком, приведенным на рис. 1. Переход ламинарного течения в турбулентное происходит скачком, когда число Рейнольдса переходит критическое значение $R_c \approx 2200$ – 2800 . При этом коэффициент сопротивления трубы также увеличивается скачком.

Градиент давления $\partial\tilde{p}/\partial z$, согласно (2), (5), зависит только от времени, поэтому можно записать

$$\frac{\partial\tilde{p}}{\partial z} = \frac{\Delta p}{l}, \quad \Delta p = p_2 - p_1, \quad p_1 = p_0 - \delta p, \quad p_2 = p_0 + \delta p, \quad (8)$$

где p_0 — постоянное давление жидкости в равномерно движущемся потоке; p_1, p_2 — давление жидкости в трубе на ее концах; δp — приращение давления на концах трубы за счет различия скоростей движения жидкости в трубе \tilde{v} и во внешнем потоке с составляющей V_3 вдоль оси z , которое определяется интегралом Бернулли [9]

$$\delta p = \frac{1}{2}\rho(\tilde{v} - V_3)^2 \text{sign}(\tilde{v} - V_3). \quad (9)$$

Подставляя (6)–(9) в (5), приходим к уравнению Риккати для ламинарного течения

$$\frac{d\tilde{v}}{dt} + \frac{1}{l}((\tilde{v} - V_3)^2 \operatorname{sign}(\tilde{v} - V_3) + \frac{8\nu}{a^2}\tilde{v}) = 0 \quad (10)$$

и уравнению с дробной степенью скорости для турбулентного течения

$$\frac{d\tilde{v}}{dt} + \frac{1}{l}(\tilde{v} - V_3)^2 \operatorname{sign}(\tilde{v} - V_3) + 0,0665 \left(\frac{\nu}{a^5}\right)^{0,25} |\tilde{v}|^{1,75} \operatorname{sign} \tilde{v} = 0. \quad (11)$$

Рассмотрим простейшую задачу, когда труба неподвижно находится в равномерно движущемся потоке со скоростью $V_3 > 0$ и $V_3 < 0$ вдоль оси z при начальной скорости в трубе $\tilde{v}(0) = \tilde{v}_0$. Тогда, вводя безразмерные переменные

$$\begin{aligned} u &= \frac{\tilde{v}}{|V_3|}, & u_0 &= \frac{\tilde{v}_0}{|V_3|}, & \tau &= \frac{|V_3|t}{l}, \\ \kappa &= \frac{8l\nu}{a^2|V_3|}, & \kappa' &= 0,0665 \left(\frac{\nu}{a^5|V_3|}\right)^{0,25}, & \Delta\bar{p} &= \frac{\Delta p}{\rho V_3^2}, \end{aligned} \quad (12)$$

представим уравнения (10), (11) соответственно при $V_3 > 0$ и $V_3 < 0$ в безразмерной форме для ламинарного течения

$$\frac{du}{d\tau} - (u - 1)^2 + \kappa u = 0, \quad \frac{du}{d\tau} + (u + 1)^2 + \kappa u = 0 \quad (13)$$

и турбулентного течения

$$\frac{du}{d\tau} - (u - 1)^2 + \kappa'|u|^{1,75} = 0, \quad \frac{du}{d\tau} - (u + 1)^2 + \kappa'|u|^{1,75} = 0, \quad (14)$$

где принято, что скорость в трубе \tilde{v} не превосходит по модулю скорость внешнего потока V_3 , т. е. $|u| \leq 1$. В случае идеальной жидкости ($\nu = 0$) из (13), (14) следует соответственно при $V_3 > 0$ и $V_3 < 0$ решение

$$u(\tau) = 1 - \frac{1 - u_0}{1 + (1 - u_0)\tau}, \quad u(\tau) = -1 - \frac{1 + u_0}{1 + (1 + u_0)\tau}. \quad (15)$$

На рис. 2 приведены зависимости скорости $u(\tau)$ (кривые 1) и перепада $\Delta\bar{p}$ давления (кривые 2) при $V_3 > 0$, $u_0 = 0$ для ламинарного (сплошные) и турбулентного (штрихпунктирные) течений вязкой жидкости ($\nu \neq 0$), а также для течения идеальной (штриховые) жидкости ($\nu = 0$). Как видим, выход на стационарный режим течения в трубе обусловлен уменьшением перепада давления. Вязкость лишь ускоряет выход, особенно при турбулентном течении. Здесь приняты следующие значения параметров: $l = 0,48$ м, $a = 0,01$ м, $\nu = 7 \cdot 10^{-5}$ м²с⁻¹, $V_3 = 200$ мс⁻¹.

Рассмотрим задачу о течении жидкости в трубе, находящейся в равномерно движущемся потоке, при ее повороте из начального стационарного состояния $\tilde{v}(0) = \tilde{v}_0$. Для этого необходимо задать вектор пространственного потока в некоторой системе координат, т. е. его координатные составляющие V_1 , V_2 , V_3 , соответственно вдоль осей x , y , z . Для неподвижной трубы составляющая потока вдоль трубы представляется формулой $V_3 = V_{13} \cos \beta_1$, где $V_{13} = \sqrt{V_1^2 + V_3^2}$ — проекция вектора потока на плоскость xz ; β_1 — угол между осью z

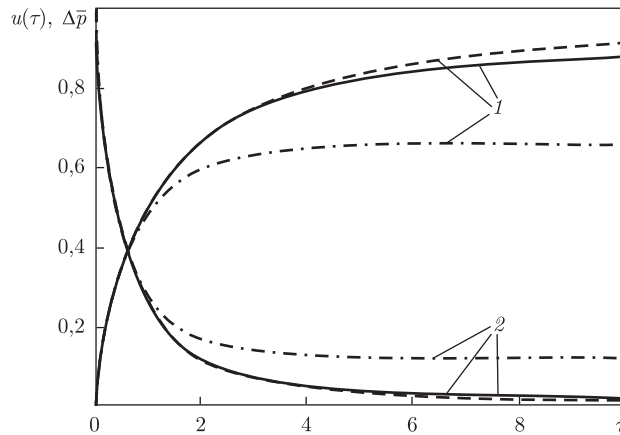


Рис. 2

и V_{13} . При равномерном во времени повороте трубы в плоскости xz на угол π против часовой стрелки в течение времени t_0 составляющая внешнего потока вдоль трубы будет функцией времени $V_3 = V_{13} \cos(\beta_1 - \pi t/t_0)$. Тогда уравнения (10), (11) с начальным условием $\tilde{v}(0) = \tilde{v}_0$ в соответствующих безразмерных переменных при $\tilde{v}_0 > 0$ примут соответственно вид

$$\frac{du}{d\tau} + \tau_0 [u - \cos(\beta_1 - \pi\tau)]^2 \text{sign}[u - \cos(\beta_1 - \pi\tau)] + \tau_0 \kappa u = 0, \quad (16)$$

$$\frac{du}{d\tau} + \tau_0 [u - \cos(\beta_1 - \pi\tau)]^2 \text{sign}[u - \cos(\beta_1 - \pi\tau)] + \tau_0 \kappa' |u|^{1,75} \text{sign} u = 0, \quad (17)$$

где обозначено

$$u = \frac{\tilde{v}}{|V_{13}|}, \quad u_0 = \frac{\tilde{v}_0}{|V_{13}|}, \quad \tau = \frac{t}{t_0}, \quad \tau_0 = \frac{|V_{13}|t_0}{l}, \quad (18)$$

$$\kappa = \frac{8l\nu}{a^2|V_{13}|}, \quad \kappa' = 0,0665 \left(\frac{\nu}{a^5|V_{13}|} \right).$$

При $\tilde{v}_0 < 0$ уравнения (10), (11) соответственно принимают вид

$$\frac{du}{d\tau} + \tau_0 [u + \cos(\beta_1 + \pi\tau)]^2 \text{sign}[u + \cos(\beta_1 + \pi\tau)] + \tau_0 \kappa u = 0, \quad (19)$$

$$\frac{du}{d\tau} + \tau_0 [u + \cos(\beta_1 + \pi\tau)]^2 \text{sign}[u + \cos(\beta_1 + \pi\tau)] + \tau_0 \kappa' |u|^{1,75} \text{sign} u = 0. \quad (20)$$

Если поворот трубы в плоскости xz осуществляется по часовой стрелке, то в уравнениях (16), (17), (19), (20) в слагаемом $\pi\tau$ необходимо изменить знак на противоположный. Очевидно, что решения таких уравнений совпадают с решениями уравнений (16), (17), (19), (20) лишь при $\beta_1 = 0$ ($V_1 = 0$), т. е. при условии, что труба в плоскости xz направлена вдоль максимальной скорости течения потока. Аналогичные выкладки и построения уравнений могут быть проведены при повороте трубы в плоскости yz .

Схемы опытов по определению скорости эфирного ветра на основе эффектов первого порядка. Рассмотренные выше уравнения и закономерности течения жидкости в трубе, находящейся в стационарном потоке, могут быть положены в основу схем опытов

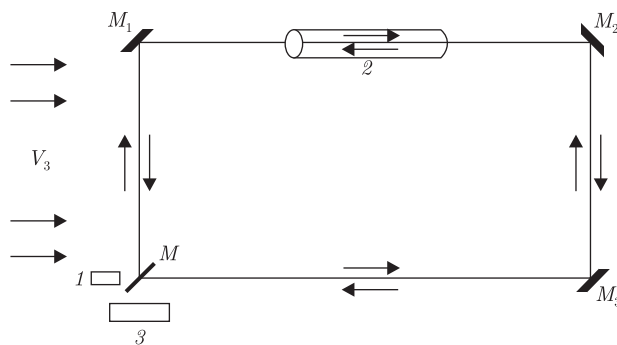


Рис. 3

по определению скорости эфирного ветра на основе эффектов первого порядка. Для этого воспользуемся установкой (рис. 3) опыта Хека [4], представляющей собой интерферометр Саньяка, на одном из четырех отрезков оптического пути которого находится наполненная водой труба так, чтобы через нее проходил луч света. Но, в отличие от опыта Хека, трубу 2 считаем открытой и заполненной окружающим ее эфиром, причем стенки трубы непроницаемы для потока эфира. Свет от источника 1, падая под углом 45° на полупрозрачное зеркало M , разделяется на два пучка, которые проходят путь $M_1M_2M_3$ в противоположных направлениях, отражаясь от зеркал, расположенных под углами 45° . После повторного взаимодействия с полупрозрачным зеркалом M оба пучка интерферируют, что фиксируется в детекторе 3 в виде картины полос.

Если установка неподвижно находится в равномерно движущемся потоке эфира, то времена прохождения оптического пути $MM_1M_2M_3M$ первым пучком и $MM_3M_2M_1M$ вторым пучком равны, если скорость движения эфира в трубе такая же, как и вне ее. В случае их различия соответствующие времена будут различаться только за счет прохождения участка трубы длиной l отрезка M_1M_2 и противоположного участка длиной l отрезка M, M_3 . Эти времена определяются формулами

$$t_1 = \frac{l}{c + \tilde{v}(t)} + \frac{l}{c - V_3} \approx \frac{2c + \tilde{v}(t) - V_3}{c^2}; \quad t_2 = \frac{l}{c + V_3} + \frac{l}{c - \tilde{v}(t)} \approx \frac{2c + \tilde{v}(t) - V_3}{c^2}. \quad (21)$$

Разность этих времен

$$\Delta t = t_2 - t_1 = 2l \frac{V_3 - \tilde{v}(t)}{c^2} \quad (22)$$

приводит к смещению интерференционных полос в детекторе

$$m(\tau) = \frac{c}{\lambda} \Delta t = \frac{2lV_3}{c\lambda} [1 - u(\tau)], \quad (23)$$

где c — скорость света; λ — длина волны источника 1 когерентного света и приняты обозначения (12).

Аналогичные формулы можно получить для подобной установки на основе интерферометра Рождественского [7]. Они будут отличаться только отсутствием множителя 2 в числителе, т. е. чувствительность установки будет в два раза ниже.

Из выражения (23), связывающего в динамическом режиме смещение полос $m(\tau)$, скорость течения эфира в трубе $u(\tau)$ и скорость внешнего потока эфира V_3 , легко определить

скорость V_3 , если для некоторого момента времени $\tau = \tau'$ известны смещение полос $m(\tau')$ и скорость течения эфира в трубе $u(\tau')$. Самой простой и доступной представляется следующая процедура опыта. Если торцы трубы закрыть заслонками, непроницаемыми для потока эфира, то скорость эфира в трубе равна нулю при $V_3 \neq 0$. При мгновенном снятии заслонок детектор должен зафиксировать смещение полос $m(0)$, соответствующее нулевой скорости течения эфира в трубе $u(0) = 0$. Тогда из (23) находим

$$V_3 = \frac{c\lambda m(0)}{2l}. \quad (24)$$

Меняя расположение установки в пространстве так, чтобы труба была поочередно направлена вдоль осей x , y , определим также составляющие эфирного ветра V_1, V_2 .

Если эфир представляет собой идеальную жидкость, то, как следует из (15), $u(\infty) = 1$, т. е. $m(\infty) = 0$ согласно (23). Если эфиру присуща вязкость, то, принимая его течение в трубе турбулентным, получим, согласно (12), (14), (23), соотношения

$$\kappa' = 0,0665 \left(\frac{\nu}{a^5 |V_3|} \right)^{0,25}, \quad [1 - u(\infty)]^2 = \kappa' u^{1,75}(\infty), \quad c\lambda m(\infty) = 2lV_3[1 - u(\infty)], \quad (25)$$

откуда с учетом (24) следует формула для определения кинематической вязкости эфира

$$\nu = \frac{c\lambda}{2(0,0665)^4} \left(\frac{a}{l} \right)^5 \frac{m^8(\infty)}{[m(0) - m(\infty)]^7} \quad (26)$$

по измеренным в динамическом режиме смещениям полос $m(0)$, $m(\infty)$.

Если эфиру присуща вязкость, то описанная установка в принципе позволяет определить скорость движения и кинематическую вязкость эфира в статическом режиме. Для этого необходимо провести два статических опыта с трубами различных размеров l_1, a_1 и l_2, a_2 . Тогда, согласно (25), получим формулы

$$\begin{aligned} V_3 &= \frac{c\lambda}{2} \frac{m_2 - m_1 \Delta_1}{l_2 - l_1 \Delta_1}, \\ \nu &= \frac{c\lambda m_1^8}{2(0,0665)^4} \left(\frac{a_1}{l_1} \right)^5 \left(\frac{l_2 - l_1 \Delta_1}{l_1 m_2 - l_2 m_1} \right)^7 = \frac{c\lambda m_2^8}{2(0,0665)^4} \left(\frac{a_2}{l_2} \right)^5 \left(\frac{l_1 - l_2 \Delta_2}{l_2 m_1 - l_1 m_2} \right)^7, \\ \Delta_1 &= \left(\frac{l_1 a_2}{l_2 a_1} \right)^{5/7} \left(\frac{m_2}{m_1} \right)^{8/7}, \quad \Delta_2 = \frac{1}{\Delta_1}, \quad m_1 = m_1(\infty), \quad m_2 = m_2(\infty), \end{aligned} \quad (27)$$

где $m_1(\infty)$, $m_2(\infty)$ — измеренные смещения полос в статическом режиме ($\tau \rightarrow \infty$) соответственно для труб с размерами $l_1 a_1$ и $l_2 a_2$.

Более сложная процедура опыта в динамическом режиме связана с поворотом интерферометра из стационарного состояния с известной скоростью потока u_0 в трубе на 180° в течение очень малого времени t_0 . Вследствие инерционности потока в трубе такой поворот приводит к существенному увеличению разности скоростей в трубе и вне ее, что ведет к увеличению смещения полос, повышающему чувствительность установки и точность измерений. Уравнения (16)–(20) позволяют определить скорость $u(\tau)$ движения потока в трубе для $0 \leq \tau \leq 1$, при этом $u(1)$ является начальным условием при решении уравнений (14) для неподвижной трубы после ее поворота. Совместное решение уравнений (14), (20) представлено на рис. 4 в виде зависимостей скорости потока в трубе $u(\tau)$ (сплошные кривые),

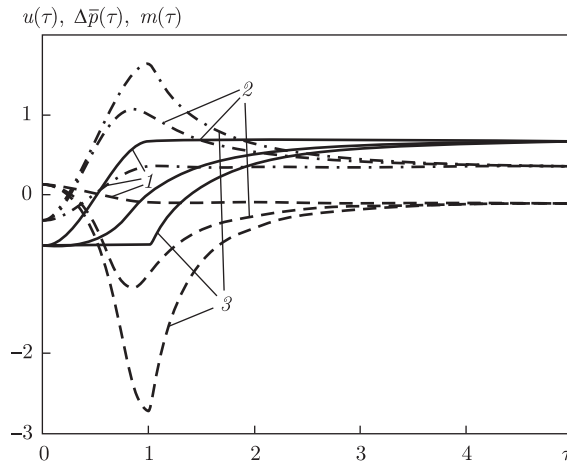


Рис. 4

перепада давления $\Delta\bar{p}(\tau)$ (штриховые кривые) и смещения интерференционных полос $m(\tau)$ согласно (23) (штрихпунктирные кривые) для значений параметров $l = 0,48$ м, $a = 0,01$ м, $\nu = 7 \cdot 10^{-5}$ м²с⁻¹, $|V_3| = 200$ мс⁻¹, $u_0 = -0,657$, $\beta_1 = 0$. При этом кривые 1, 2, 3 соответствуют времени поворота трубы t_0 , равному 1 с, $3 \cdot 10^{-3}$ с, $7 \cdot 10^{-7}$ с. Как видим, при $t_0 \geq 1$ с выйти на динамический режим течения в трубе невозможно для данных значений параметров. Поэтому утверждение [7], что интерферометр переходил в динамический режим работы после поворота на 180° в течение 3 с, не соответствует действительности. Расчет согласно (16)–(20) для $l = 0,48$ м, $a = 0,01$ м, $\nu = 7 \cdot 10^{-5}$ м²с⁻¹, $\beta_1 = 0$ при повороте такого прибора в течение 3 с на 180° показывает, что динамический режим можно наблюдать лишь для скорости внешнего потока $V_3 < 1$ мс⁻¹. Это свидетельствует о явном подлоге в работах [6, 7], где якобы таким путем определена скорость эфирного ветра порядка 200 мс⁻¹ вблизи земной поверхности.

1. *Michelson A. A., Pease F. G., Pearson F.* Repetition of the Michelson–Morley experiment // J. of the Optical Society of America and Review of Scientific Instruments. – 1929. – **18**, No 3. – P. 181–182.
2. *Miller D. C.* Ether-drift experiment at Mount Wilson // Proceedings of Nat. Acad. Sci. – 1925. – **11**. – P. 306–314.
3. *Khoroshun L. P.* General dynamic equations of electromagnetomechanics for dielectrics and piezoelectrics // Int. Appl. Mech. – 2006. – **43**, No 4. – P. 407–420.
4. *Тоннела М.-А.* Основы электромагнетизма и теории относительности. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1962. – 483 с.
5. *Hariharan P.* Basics of interferometry. – New York: Academic Press, 2007. – 226 p.
6. *Галаев Ю. М.* Результаты повторения эксперимента Д. К. Миллера в диапазонах радио- и оптических волн / Под ред. В. А. Ацюковского // Эфирный ветер. – Москва: Энергоатомиздат, 2011. – 419 с.
7. *Galaev Yu. M.* The measuring of ether-drift velocity and kinematic ether viscosity within optical waves band // Spacetime and Substance. – 2002. – **3**, No 5(14). – P. 207–224.
8. *Слезкин Н. А.* Динамика вязкой несжимаемой жидкости. – Москва: ГИТТЛ, 1955. – 520 с.
9. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа. – Москва: Наука, 1978. – 736 с.

Л. П. Хорошун

Гідродинамічна теорія експериментального визначення швидкості ефірного вітру на основі ефекту першого порядку

Побудовано рівняння нестационарної осередненої течії в'язкої рідини у циліндричній трубі, яка знаходиться у потоці, що рівномірно рухається. Досліджено розв'язки для нерухомої труби і при її повороті у випадку ламінарної і турбулентної течії. Розв'язано задачі з визначення швидкості і кінематичної в'язкості ефіру за вимірними зміщеннями полос статичної і динамічної інтерференційної картини у модифікованій установці Хека.

L. P. Khoroshun

Hydrodynamic theory of experimental determination of the ether wind speed on the basis of a first-order effect

The equations for the nonstationary averaged flow of a viscous liquid in the cylindrical tube, being in a uniformly moving current, are constructed. The solutions for fixed and turning tubes in case of laminar and turbulent flows are investigated. The problems of determination of the speed and the kinematic viscosity of the ether on the basis of measured static and dynamic displacements of the interference fringes in a modified Hoek installation are solved.

Амплітудно-фазові характеристики радіальних коливань тонкого п'єзокерамічного диска біля резонансів

На прикладі відомої задачі про радіальні коливання тонкої круглої п'єзокерамічної пластини з суцільними електродами досліджуються амплітудно-фазові залежності для радіальних зміщень, суми головних напружень і компонентів повної провідності в околі резонансних і антирезонансних частот. Результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними даними, отриманими за опрацьованою авторами новою методикою.

Колівання п'єзокерамічних елементів конструкцій характеризуються високими коефіцієнтами електромеханічного зв'язку і значними амплітудами механічних напружень та зміщень. Сама природа внутрішніх фізичних процесів у таких тілах призводить до того, що і зміщення, і напруження, і провідність, і імпеданс мають біля резонансних частот як активні, так і реактивні компоненти. Розрахувати будь-яку амплітуду можливо лише тоді, коли беруться до уваги втрати енергії. Донині аналітичні розв'язки задач про електромеханічні коливання таких тіл побудовані лише для простих геометричних форм, таких як стрижні, пластини, диски, циліндричні й сферичні оболонки тощо. Такі розв'язки застосовуються у стандартах для експериментального визначення коефіцієнтів зв'язку та компонентів тензорів пружних, діелектричних і п'єзоелектричних сталей.

Електромеханічні коливання збуджуються за допомогою електричного поля, яке створюється електричною напругою, прикладеною до розміщених на поверхні електродів, невід'ємно зв'язаних з поверхнею. Міжелектродна ємність п'єзокерамічних елементів конструкцій досягає кільканадцяти нанофарад і істотно впливає на внутрішні процеси в них.

У даній роботі на прикладі відомої задачі про радіальні коливання тонкої круглої п'єзокерамічної пластини з суцільними електродами досліджуються амплітудно-фазові залежності в околі резонансних і антирезонансних частот. Розрахунки амплітуд і фаз для радіальних зміщень на ободі диска, суми головних напружень в його центрі і компонентів повної провідності ведуться з використанням одержаних в експерименті за новою методикою даних. Результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними даними.

Фазові зсуви при радіальних коливаннях тонкого диска. В [1–3] наведено вирази для радіальних зміщень U_r , суми головних напружень $\sigma_r + \sigma_\theta$ і повної провідності Y , на основі яких можемо записати такі співвідношення:

$$U_r = \frac{(1 + \nu)d_{31}E_z J_1(\lambda x)}{\Delta(x)}, \quad (1)$$

$$\sigma_r + \sigma_\theta = \frac{d_{31}E_z}{s_{11}^E(1 - \nu)} \left(\frac{(1 + \nu)x J_0(\lambda x)}{\Delta(x)} - 2 \right), \quad (2)$$

$$Y = j\omega C_0 \left[1 - k_p^2 + \frac{(1 + \nu)k_p^2 J_1(x)}{\Delta(x)} \right] = j\omega C_0 \frac{\Delta_a(x)}{\Delta(x)}, \quad (3)$$

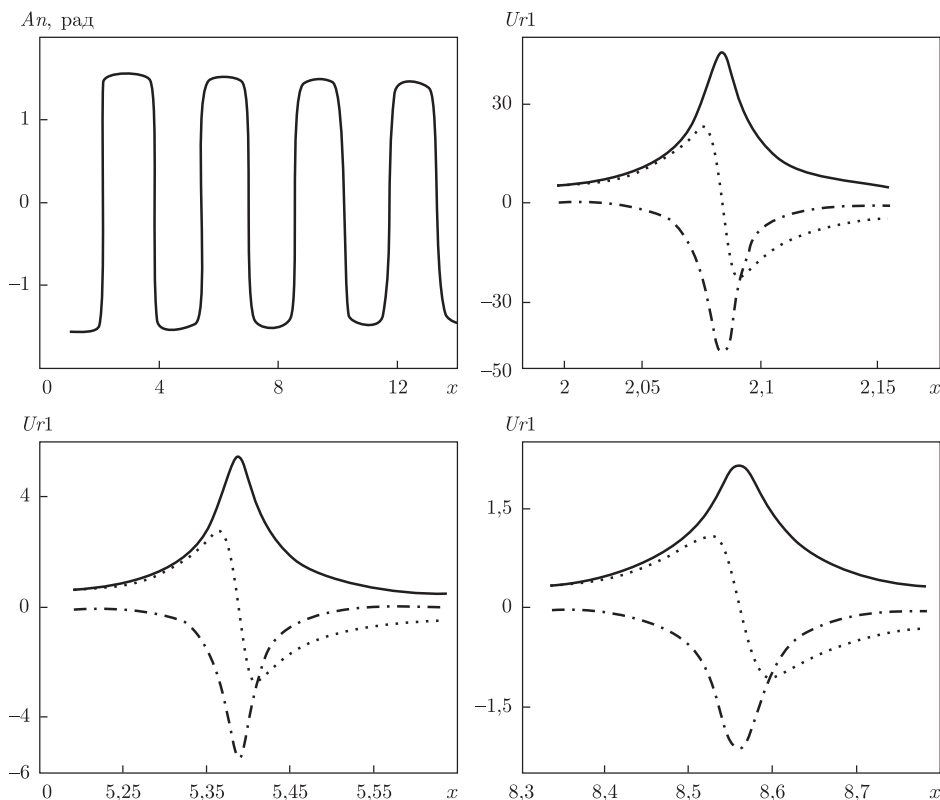


Рис. 1. Фазові зсуви в радіальних зміщеннях біля краю диска на перших чотирьох резонансах і АЧХ компонентів зміщень в околі резонансних частот

де $\Delta(x) = xJ_0(x) - (1 - \nu)J_1(x)$ — резонансний, а $\Delta_a(x) = (1 - k_p^2)\Delta(x) + (1 + \nu)k_p^2J_1(x)$ — антирезонансний визначник; ν — коефіцієнт Пуассона; $\lambda = r/R$ — відношення радіусів точки спостереження до радіуса пластини; d_{31} — п'єзомодуль; E_z — напруженість електричного поля; C_0 — власна статична ємність; x — безрозмірна частота; ω — кругова частота; j — уявна одиниця.

Вирази (1) — (3), резонансний та антирезонансний визначники, а також безрозмірна частота [4] і планарний КЕМЗ [3, 5] є комплексними функціями

$$x = x_0 - jx_2; \quad x_2 = 0,5s_{11M}x_0, \quad (4)$$

$$k_p^2 = k_{po}^2[1 + j(s_{11M} + \varepsilon_{33M} - 2d_{31M})]. \quad (5)$$

На рис. 1 наведено графіки фазочастотних і амплітудно-частотних залежностей, розрахованих за формулою (1) для конкретного п'єзокерамічного диска із ЦТБС-3 з розмірами $66,4 \cdot 3,1$ мм, в якому $C_0 = 18,5$ нФ, тангенс діелектричних втрат $\varepsilon_{33m} = 0,0085$; тангенс механічних втрат $s_{11m} = 0,0069$; коефіцієнт Пуассона $\nu = 0,35$; квадрат планарного КЕМЗ $k_{po}^2 = 0,31$; тангенс п'єзоелектричних втрат $d_{31m} = 0,0076$. По горизонталі відкладена безрозмірна частота x . По вертикалі (на першому графіку) — кут між реактивним і активним компонентами радіальних зміщень біля краю пластини ($\lambda = 0,998$), а на інших трьох — компоненти відношення $U_{r1} = U_r/(d_{31}E_z)$ в тій же точці для перших трьох радіальних резонансів. Активні складові зображені штрихпунктирними кривими, реактивні — пунктирними, а їхня векторна сума, тобто абсолютне значення комплексних чисел, — суцільними лініями.

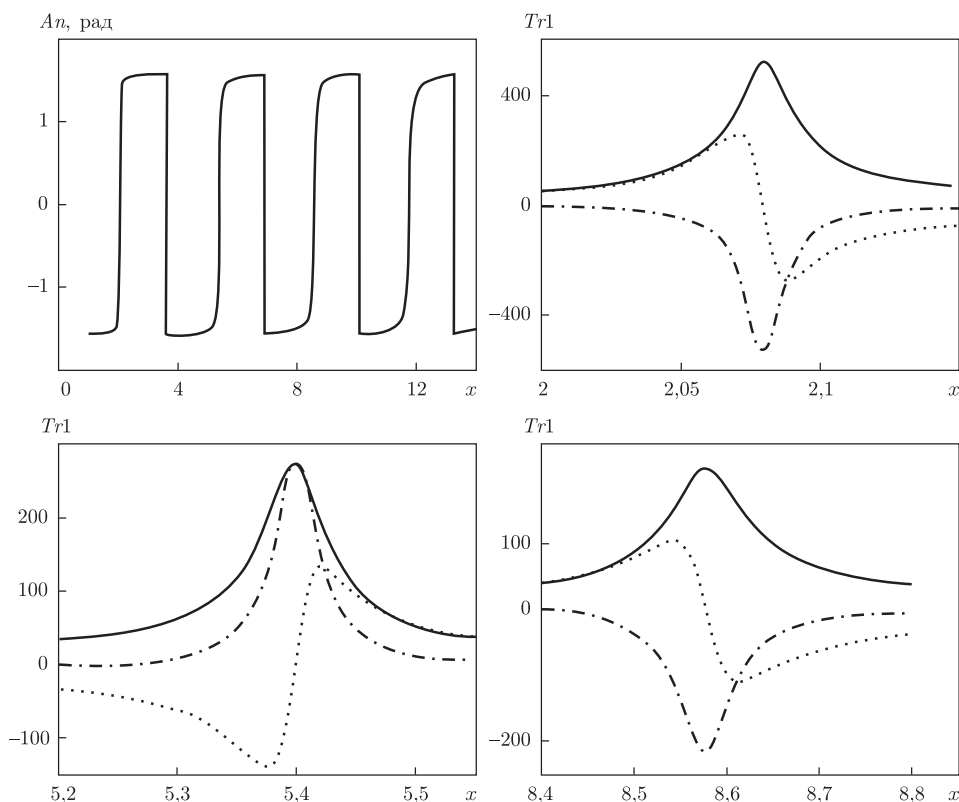


Рис. 2. Фазові зсуви суми головних напружень в центрі диска на перших чотирьох резонансах і АЧХ компонентів цієї суми в околі резонансних частот

Щоб перейти від U_{r1} до U_r (у метрах), треба помножити число, яке є ординатою, на $d_{31}E_z$. В нашому диску, наприклад, $d_{31} = 1,64 \cdot 10^{-10}$ Кл/Н і витримує він на першому резонансі без нагрівання поле до 1000 В/м. Простий розрахунок показує, що максимальні зміщення біля обода становлять 9 мкм. На наступних двох резонансах амплітуда радіальних зміщень знижується майже в десять і двадцять разів.

Аналіз графіків показує, що в околі кожного радіального резонансу кут між реактивною і активною складовими радіальних зміщень змінюється від $-\pi/2$ до $\pi/2$, спадаючи на резонансних частотах до нуля. На всіх трьох амплітудно-частотних залежностях хід відповідних кривих подібний і відрізняються вони лише амплітудами. На кожному з перших трьох радіальних резонансів активна складова досягає свого максимального значення, тоді як реактивна складова спершу зростає, потім спадає до нуля і знову зростає, змінивши знак. При підході до резонансу знак реактивності позитивний, при відході — негативний. Наступна зміна знака реактивної складової спостерігається в проміжках між резонансами, саме в тих точках, де відбувається перехід фази від $\pi/2$ до $-\pi/2$.

На рис. 2 подано аналогічні залежності, розраховані за формулою (2) для суми головних напружень у центрі пластини ($\lambda = 0,01$) в тих же частотних інтервалах. Символом $Tr1$ позначено відношення $(\sigma_r + \sigma_\theta)s_{11}^E(1 - \nu)/d_{31}E_z$. Помноживши безрозмірне число $Tr1$ на $d_{31}E_z/(s_{11}^E(1 - \nu))$, одержимо суму головних напружень в центрі пластини в паскалях. У нашому прикладі $s_{11}^E = 16,2 \cdot 10^{-12}$ м²/Н, тому $Tr = 9,1 \cdot 10^6$ Па на першому радіальному резонансі і знижується на другому та третьому приблизно у півтора і два рази.

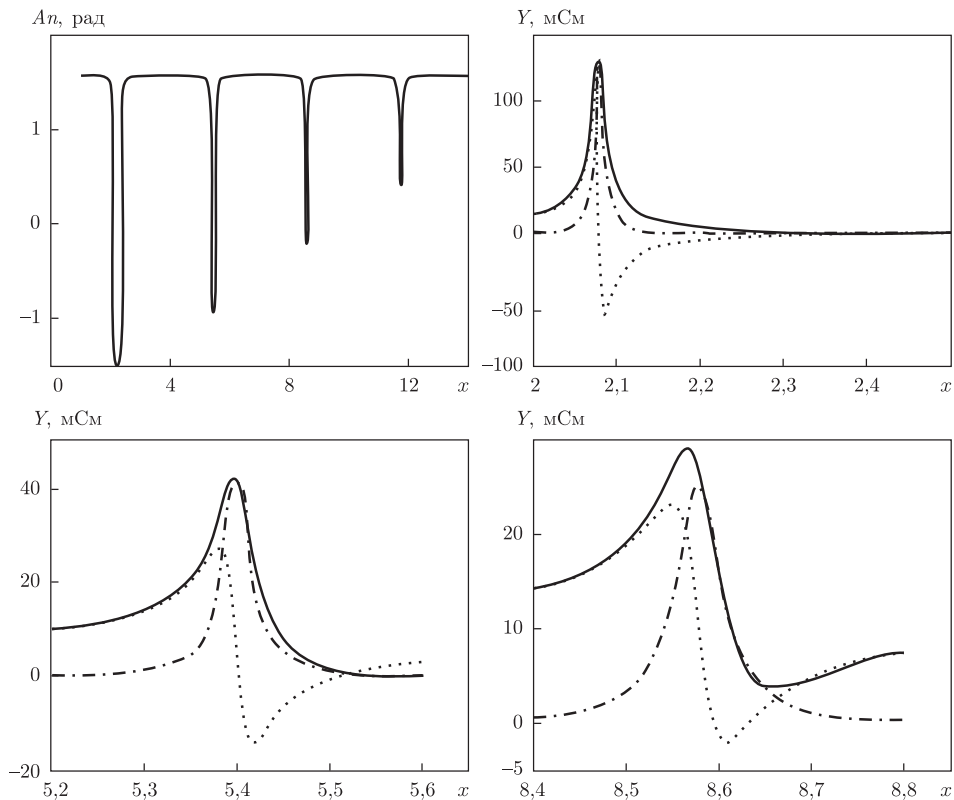


Рис. 3. Фазові зсуви між компонентами повної провідності диска на перших чотирьох резонансах і АЧХ цих компонентів в околі резонанс — антирезонанс

У випадку суми головних напружень також має місце зміна фазового зсуву між реактивним і активним компонентами від $-\pi/2$ до $\pi/2$ при проходженні кожного радіального резонансу та зміна від $\pi/2$ до $-\pi/2$ — у зворотному напрямку між резонансами. Якщо у попередньому випадку між резонансами змінювалася лише полярність реактивної складової, то тепер зміна полярності компонентів відбувається одночасно, так що до кожного наступного резонансу вони наближаються з однаковим співвідношенням полярностей. Цією обставиною й пояснюється подібність фазових залежностей для радіальних зміщень біля краю пластини і головних напружень у її центрі.

На рис. 3 наведено аналогічні залежності, розраховані за формулою (3) для повної провідності пластини. Частотні інтервали розширені в бік високих частот і вміщують як резонанс, так і антирезонанс. Символом Y позначено повну провідність та її активний і реактивний компоненти (у мілісіменсах). Слід відзначити, що діапазон зміни повної провідності від максимального до мінімального значень на першій радіальній моді дуже широкий — від 129 до 0,09 мСм. На другій і третій радіальних модах маємо відповідно 42 і 1,15 та 29 і 4,5 мСм. Усі ці розраховані за графіками числа дуже близькі до експериментальних даних. Полярність активного та реактивного компонентів при підході до кожного наступного резонансу і їх співвідношення зберігаються. Зворотні переходи фази відбуваються не в проміжку між сусідніми резонансами, як було для зміщень і напружень, а на антирезонансних частотах. Фазовий кут між компонентами повної провідності змінюється в межах від $\pi/2$ до $-\pi/2$ і назад тільки на першому радіальному резонансі. На другому резонансі кут змінюється

від $\pi/2$ до $-0,9$ рад і назад, на третьому — від $\pi/2$ до $-0,2$ рад і назад, а на четвертому — лише до $0,4$ рад і назад.

Слід підкреслити, що на рис. 1, 2 наведені лише результати розрахунків для тих місць пластини, де відповідні величини досягають своїх максимальних значень. В інших точках радіуса картина фазових залежностей набагато складніша.

Експериментальне визначення фазових зсувів. Фазові зсуви між струмом, що протікає через п'єзоелемент при радіальних коливаннях, і прикладеною до нього різницею потенціалів визначалися за новою методикою. Досліджуваний п'єзоелемент приєднувався до генератора електричних сигналів ультразвукових частот через узгоджувальний подільник напруги [3, 6], складений із двох послідовно з'єднаних резисторів $R1 = 68$ і $R2 = 10$ Ом, з коефіцієнтом ділення $7,8 : 1$. Електрична напруга, яка виділяється на резисторі $R2$, є вхідною різницею потенціалів U_{in} для схеми вимірювання. Щоб визначити електричний струм I , що проходить через п'єзоелемент при його взаємодії з електричним полем збудження, до нього послідовно приєднувався резистор навантаження R і вимірювався спад напруги на ньому U_R . Опір резистора навантаження R вибирався з урахуванням рекомендацій робіт [6–8] і становив $11,2$ Ом або 20 кОм. Водночас цей струм створював на самому п'єзоелементі спад напруги U_{pe} . За означенням, повна провідність Y є відношенням струму I до спаду напруги U_{pe} [1, 3]

$$Y = \frac{I}{U_{pe}} = \frac{U_R}{U_{pe}R}. \quad (6)$$

П'єзоелемент Pe і резистор навантаження R приєднувалися до виходу подільника напруги через двополосний комутатор [9], який давав можливість за допомогою одного й того ж вольтметра на кожній вибраній частоті вимірювати по чергово спади напруг U_R та U_{pe} , а також вхідну напругу U_{in} . Ці три спади напруг утворюють своєрідний трикутник, в якому кути напроти відповідних сторін можна розрахувати за теоремою косинусів

$$\cos \alpha = \frac{U_{pe}^2 + U_R^2 - U_{in}^2}{2U_{pe}U_R}, \quad \cos \beta = \frac{U_{in}^2 + U_R^2 - U_{pe}^2}{2U_{in}U_R}, \quad \cos \gamma = \frac{U_{in}^2 + U_{pe}^2 - U_R^2}{2U_{in}U_{pe}} \quad (7)$$

або виміряти транспортиром після графічної побудови.

Частота генератора ГЗ-56/1 змінювалася від 20 до 200 кГц і вольтметром ВЗ-38 вимірювалися спади напруг U_{in} , U_{pe} та U_R . Одержані в такий спосіб дані заносилися в комп'ютер і будувалися частотні залежності кутів α , β і γ , як відповідних арккосинусів. Одночасно за формулою (2) вираховувалася повна провідність пластини. За графіками АЧХ біля резонансних і антирезонансних частот на рівні -3 дБ визначалися компоненти добротності Q_m [10], які бралися до уваги при розрахунках для рис. 1–3.

На рис. 4 подано амплітудно-фазові характеристики повної провідності на перших двох радіальних резонансах, розраховані за формулою (3), а також визначені експериментально із застосуванням теореми косинусів (7). На верхніх графіках до залежностей типу $v = \text{atan}(w)$ (суцільні лінії, $w = \text{imag}(Y)/\text{real}(Y)$) додано криві $\text{abs}(v)$ (штрихпунктирні лінії). Так зроблено тому, що в експерименті вольтметр не реагує на полярність вимірюваних напруг, а тільки на їх ефективні значення. Через цю обставину побудовані вище графіки відображають не самі фазові зсуви, а їхні абсолютні значення. Модуль фазового зсуву між реактивною і активною складовими повної провідності на частотах резонансів і антирезонансів знижується до нуля, а потім зростає в обидва боки на першому резонансі до $\pi/2$.

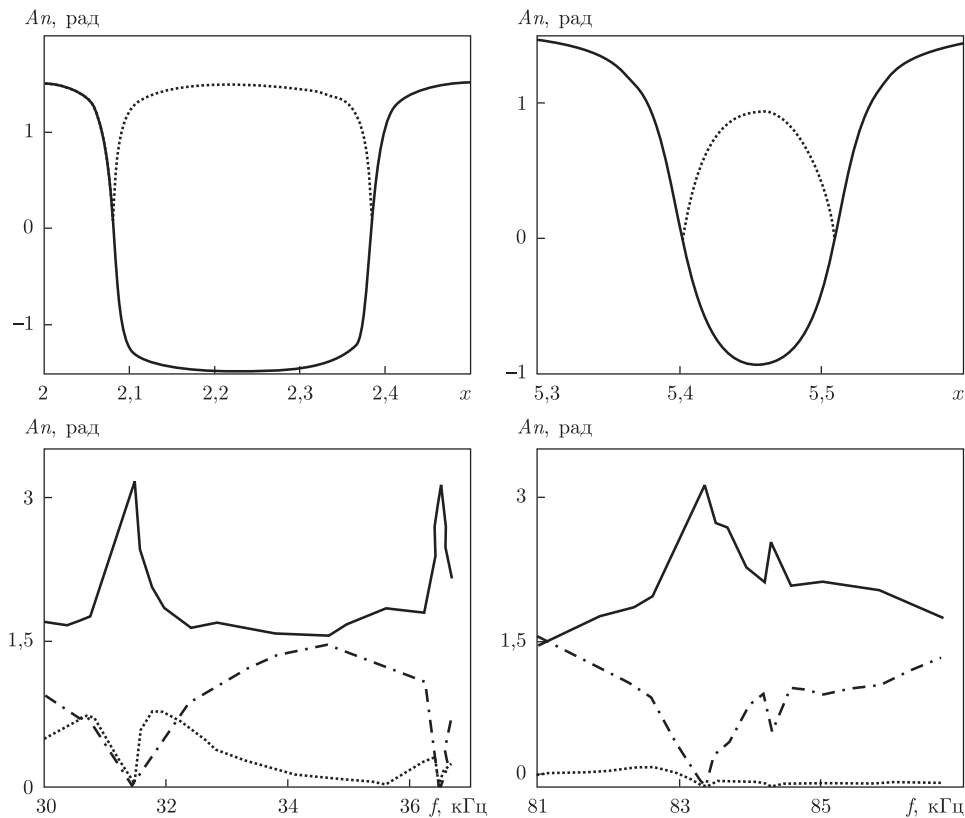


Рис. 4. Фазові зсуви між компонентами повної провідності диска біля перших двох радіальних резонансів

На другому резонансі зростання фазового зсуву до $\pi/2$ має місце лише раніше від резонансу і пізніше за антирезонанс. У проміжку резонанс — антирезонанс фазовий зсув не перевищує 0,9 рад. На нижніх графіках наведено фазово-частотні залежності кутів характеристичного трикутника.

Кут α (суцільні криві) утворений сторонами U_R та U_{pe} і характеризує фазовий зсув між струмом в п'єзоелементі і напругою на його електродах. Кут β (штрихпунктирні криві) утворений сторонами U_{in} та U_R і характеризує фазовий зсув між напругою на виході генератора та споживаним від генератора струмом. Кут γ (пунктирні криві) утворений сторонами U_{in} та U_{pe} , тобто між спадами напруги на виході генератора і на п'єзоелементі. Хід кривих кута β на першому резонансі та антирезонансі, а також на другому резонансі, ідентичний до розрахованих фазових зсувів між компонентами повної провідності. На другому антирезонансі мінімум не досягає нуля, що пояснюється неточностями вимірювань при малих струмах.

На закінчення зробимо такі висновки.

1. Запропонована авторами нова розрахунково-експериментальна методика з вивчення фазових і амплітудних характеристик радіальних коливань тонких п'єзокерамічних дисків показала свою ефективність. Вона застосовувалася також для тіл ускладненої геометричної форми.

2. Фазові зсуви між активним і реактивним компонентами пружних зміщень і головних напружень залежать від місця спостереження, а для повної провідності — від величини планарного КЕМЗ. Перехід від $-\pi/2$ до $\pi/2$ відбувається у всіх випадках в околі резо-

нансних частот. Зворотний перехід для зміщень і напружень має місце в проміжках між резонансами, а для компонентів повної провідності — на антирезонансах.

3. Розрахунок фазово-частотних і амплітудно-частотних характеристик коливань у комплексній формі забезпечує результати, які добре узгоджуються з експериментами.

4. Описану методику можна рекомендувати для дослідження коливань будь-яких елементів конструкцій із п'єзокераміки.

1. Карлаш В. Л. Резонансные электромеханические колебания пьезоэлектрических пластин // Прикл. мех. – 2005. – 41, № 7. – С. 3–46.
2. Шульга Н. А., Болжисев А. М. Колебания пьезоэлектрических тел. – Киев: Наук. думка, 1990. – 228 с.
3. Шульга М. О., Карлаш В. Л. Резонансні електромеханічні коливання п'єзоелектричних пластин. – Київ: Наук. думка, 2008. – 272 с.
4. Катц Г. В. Магнитные и диэлектрические приборы. Ч. I. – Москва-Ленинград: Энергия, 1964. – 416 с.
5. Holland R., Eer Nisse E. P. Design of resonant piezoelectric devices. – Cambridge, London: MIT Press, 1969. – 256 p.
6. Глозман И. А. Пьезокерамика. – Москва: Энергия, 1972. – 288 с.
7. Шарапов В. М., Минаев И. Г., Бондаренко Ю. Ю. и др. Пьезоэлектрические преобразователи: Уч. пос. / Под ред. В. М. Шарапова. – Черкасы: ЧГТУ, 2004. – 435 с.
8. ГОСТ 12370–72. Материалы пьезокерамические, методы испытаний. – Москва: Изд-во стандартов, 1973. – 28 с.
9. Шульга М. О., Карлаш В. Л. Вимірювання повної провідності п'єзокерамічних елементів у схемі чо-тириполюсника Мезона та її варіантах // Тези IV Міжнар. наук.-техн. конф. “Датчики, прилади та системи – 2008”. – Черкаси – Гурзуф, 2008. – С. 54–56.
10. IRE Standards on Piezoelectric Crystals: Measurements of Piezoelectric Ceramics. 1961 // Proc. IRE. – 1961. – 49. – P. 1161–1169.

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

Надійшло до редакції 04.02.2013

Член-корреспондент НАН України **Н. А. Шульга**, В. Л. Карлаш

Амплитудно-фазовые характеристики радиальных колебаний тонкого пьезокерамического диска возле резонансов

На примере известной задачи о радиальных колебаниях тонкой круглой пьезокерамической пластины со сплошными электродами исследуются амплитудно-фазовые зависимости для радиальных перемещений, суммы главных напряжений и компонент полной проводимости в окрестности резонансных и антирезонансных частот. Результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными по разработанной авторами новой методике.

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **М. О. Shul'ga**, V. L. Karlash

Amplitude-phase characteristics of radial vibrations of a thin piezoceramic disk near resonances

By the example of the known problem of radial vibrations of a thin piezoceramic plate with unbroken electrodes, the amplitude-phase dependences for radial displacements and the sums of principal stresses and admittance components near the resonant and antiresonant frequencies of a disk are studied. The results of calculations are in good agreement with experimental data obtained by authors' new method.



УДК 621.315.592

П. І. Баранський, В. М. Бабич, Г. П. Гайдар

Концентраційна залежність тензоопору монокристалів n -Si

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Є. Ф. Венгером)

У широкому інтервалі концентрації носіїв заряду $10^{12} \leq n_e \equiv N_I \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при $T = 77,4 \text{ К}$ в дослідях з монокристалами n -Si експериментально одержано залежність граничних значень тензоопору $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ від n_e , яка дозволяє проводити розрахунки параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau}$ (а отже, і параметра анізотропії розсіяння $K_{\tau} = K_m/K$) для області азотних температур у припущенні, що досліджувані кристали є практично не компенсованими. Наведено пояснення наявності мінімуму на залежності $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ в області $n_e \approx 10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

На сьогодні основними матеріалами для виробництва широкого класу електронних приладів є багатодолинні напівпровідники, чільне місце серед яких посідає кремній. Прилади, виготовлені на його основі, успішно застосовуються як у наукових лабораторіях, так і в промисловій індустрії [1].

Використання монокристалів Si в таких екстремальних умовах як великі навантаження, швидкозмінні температурні режими, значні електричні, магнітні та радіаційні поля, при неухильному підвищенні жорсткості експлуатаційних умов за сукупністю ряду впливів вимагає всебічного докладного вивчення дії вищезгаданих факторів на фізичні властивості кремнію.

Дослідження явищ електронного переносу в наноструктурах і наноб'єктах на сучасному етапі розвитку напівпровідникового матеріалознавства стимулює пошук надійних значень ефективних мас, часу релаксації, констант деформаційного потенціалу та інших важливих для нанofізики параметрів [2–4]. Так, наприклад, у [5, 6] показано, що зменшення розмірності системи істотно впливає не тільки на величину рухливості носіїв заряду, але й констант деформаційного потенціалу кремнієвих напівпровідників.

Одним із найбільш ефективних і поширених способів дослідження властивостей напівпровідників є вимірювання кінетичних коефіцієнтів. Цей спосіб дозволяє відносно просто вивчати як енергетичний спектр носіїв заряду, так і їх взаємодію з кристалічною ґраткою і дефектами (механізми розсіяння).

© П. І. Баранський, В. М. Бабич, Г. П. Гайдар, 2013

За звичайних умов кристали кремнію, маючи кубічну симетрію, проявляють ізотропні властивості. У той же час, завдяки багатодолінності зонної структури, їх ізотропні характеристики (до числа яких належить, зокрема, і питомий опір) при накладанні одновісних механічних напружень вздовж відповідних кристалографічних осей трансформуються в анізотропні.

Зміна симетрії кристалів при одновісній пружній деформації призводить до істотної перебудови зонної структури і, зокрема, до зняття виродження енергетичного спектра носіїв струму. Важливим результатом, який випливає з розгляду трансформації енергетичного спектра електронів у багатодолінних напівпровідниках при одновісній деформації, є те, що екстремуми енергії, які орієнтовані вздовж еквівалентних напрямків у \vec{k} -просторі, в загальному випадку, коли вісь деформації орієнтована довільним чином відносно згаданих напрямків, будуть мати різний зсув за шкалою енергій. Значна анізотропія рухливості носіїв струму в кожному ізоенергетичному еліпсоїді, яка є характерною для багатодолінних напівпровідників, буде визначати в першу чергу значні за величиною тензоефекти у випадку сильних одновісних пружних деформацій.

Виходячи з уявлень Херрінга [7] про те, що п'єзоопір в наведено деформованих багатодолінних напівпровідниках виникає за рахунок міждолінного перерозподілу носіїв струму (при незмінній загальній їх концентрації в c -зоні), для n -Si при одновісному пружному деформуванні в кристалографічних напрямках [100] і [110] (тобто, в умовах $\vec{X} // \vec{J} // [100]$ і $\vec{X} // \vec{J} // [110]$; X – механічне навантаження; J – струм) між граничними значеннями тензоопору $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ і $\rho_{\infty}^{[110]}/\rho_0$ та параметром анізотропії рухливості

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{K_m}{K_{\tau}} = \frac{m_{\parallel} \langle \tau_{\perp} \rangle}{m_{\perp} \langle \tau_{\parallel} \rangle} \quad (1)$$

(де μ_{\parallel} , μ_{\perp} – рухливості носіїв заряду вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; $K_m = m_{\parallel}/m_{\perp}$ – параметр анізотропії ефективної маси; m_{\parallel} і m_{\perp} – циклотронні ефективні маси для окремо взятого ізоенергетичного еліпсоїда вздовж великої осі і перпендикулярно до неї відповідно; $K_{\tau} = \langle \tau_{\parallel} \rangle / \langle \tau_{\perp} \rangle$ – параметр анізотропії розсіяння; τ_{\parallel} і τ_{\perp} – компоненти тензора часу релаксації при відсутності магнітного поля в лінійному наближенні) існує простий зв'язок, що задається такими співвідношеннями [8]:

$$\frac{\rho_{\infty}^{[100]}}{\rho_0} = \frac{1}{3}(2K + 1) \quad (2)$$

і

$$\frac{\rho_{\infty}^{[110]}}{\rho_0} = \frac{2}{3} \left(\frac{2K + 1}{K + 1} \right). \quad (3)$$

Нерідко виникає потреба мати в своєму розпорядженні значення K (а, отже, і K_{τ}) для довільно вибраної концентрації носіїв заряду n_e . З цією метою при $T = 77,4$ К в широкому інтервалі концентрацій $10^{12} \leq n_e \equiv N_I \leq 10^{19}$ см⁻³ були знайдені для монокристалів кремнію, легованих домішкою фосфору (n -Si(P)), пружно деформованих в кристалографічному напрямку [100], залежності відносної зміни питомого опору від механічної напруги X

$$\frac{\rho_{X \rightarrow \infty}^{[100]}}{\rho_0} = f(X) \quad (4)$$

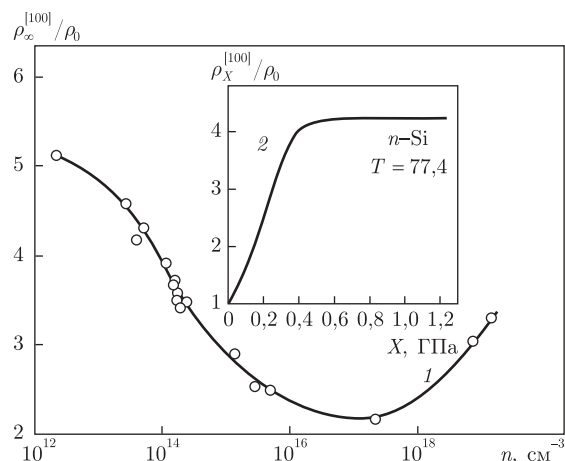


Рис. 1. Залежність тензопору $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ від n_e для зразків n -Si при $\vec{X} // \vec{J} // [100]$ (\vec{J} — струм) у концентраційному інтервалі $10^{12} \leq n_e \equiv N_I \leq 10^{19}$ см $^{-3}$ при $T = 77,4$ К (крива 1). На вставці (крива 2) — залежність тензопору від механічного напруження X на досліджуваному кристалі кремнію для $n_e \approx (5 \div 6) \cdot 10^{13}$ см $^{-3}$ при $T = 77,4$ К

(типовий приклад — вставка на рис. 1) і граничні значення цієї функції (що вимірюються при $X \rightarrow \infty$) в області її виходу на насичення у вигляді $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$. Виміри при $X \rightarrow \infty$ забезпечують в n -Si при умові $\vec{X} // \vec{J} // [100]$ повне переселення носіїв струму в два мінімуми, які опускаються вниз по шкалі енергій.

Побудувавши залежність $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$, одержали таку особливість у зміні граничних значень питомого опору з концентрацією носіїв заряду, а саме: наявність мінімуму в області $10^{17} \leq n_e \leq 10^{18}$ см $^{-3}$ (рис. 1).

Монотонне зниження значень $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ з підвищенням рівня легування невироджених кристалів аж до $N_I \equiv n_e \approx 10^{17}$ см $^{-3}$ відбувалося за рахунок зростання анізотропії розсіяння K_{τ} (при підвищенні внеску домішкового розсіяння в цьому концентраційному інтервалі) і зменшення параметра анізотропії рухливості $K = K_m/K_{\tau}$. Однак при подальшому підвищенні N_I , яким забезпечувався перехід від класичної статистики до виродженої, функція $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ досягала мінімуму і потім починала зростати, як це видно з рис. 1. Тобто, концентраційні зміни цієї функції зовні виглядали так, неначе анізотропія K_{τ} з настанням виродження починала зменшуватись і в області гранично високих значень N_I повністю зникала (тобто, $K_{\tau} = \langle \tau_{\parallel} \rangle / \langle \tau_{\perp} \rangle \rightarrow 1$), так само, як і в найбільш чистих кристалах.

Зростання функції $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ в області $n_e > 10^{18}$ см $^{-3}$ можна пояснити, імовірно, проявом деформаційного “виморожування” носіїв заряду із зони провідності (c -зони) на енергетичні рівні домішкової зони, що при цьому виникає, а також проявом часткового виродження електронного газу в сильно легованих кристалах, яке настає при цих умовах.

Наведене вище співвідношення (2), з урахуванням отриманої залежності 2 (рис. 1, вставка), забезпечує визначення величини параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau}$, а отже, і параметра анізотропії розсіяння $K_{\tau} = K_m/K$, оскільки величину параметра анізотропії ефективної маси $K_m = m_{\parallel}/m_{\perp} = 0,91 : 0,191 = 4,76$, як добре відомо для n -Si з даних вивчення циклотронного резонансу (див., наприклад, роботи [9, 10]), можна вважати в розглядуваному випадку n -Si практично незалежною від величини механічного напруження X .

На зміну спаду залежності $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ (крива 1, рис. 1), пов'язаного, як уже було відзначено, з проявом підвищеного внеску домішкового розсіяння (подібно до кристалів n -Ge [11]), що супроводжується зниженням "деформаційної чутливості" зразків більш високого рівня легування (тобто, при наближенні електронного газу в кристалах до виродженого стану), при подальшому підвищенні $n_e > 10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$ і появою домішкової зони (замість домішкового рівня енергії в забороненій зоні слабо легованих кристалів), поряд зі звичайним механізмом деформаційного міжмінімумного перерозподілу носіїв з'являється можливість деформаційного "виморожування" носіїв заряду із c -зони на вільні рівні домішкової зони, енергетичне положення яких в забороненій зоні може проявляти ще й деформаційно-обумовлену залежність. Це й приводить (в області $n_e > 10^{18} \text{ см}^{-3}$) до зростання $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$.

Як наведені тут, так і опубліковані раніше (див., наприклад, [12]) результати вказують на те, що досліджуване відношення $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$, а отже, і пов'язані з ним значення параметра анізотропії рухливості в окремо взятому ізоенергетичному еліпсоїді

$$K = \frac{\mu_{\perp}}{\mu_{\parallel}} = \frac{3}{2} \frac{\rho_{\infty}}{\rho_0} - \frac{1}{2}, \quad (5)$$

а також параметра анізотропії термо-ЕРС захоплення електронів фононами, який визначається відповідними компонентами тензора термо-ЕРС для електронів, що належать одному мінімуму енергії

$$M = \frac{\alpha_{\parallel}^{\Phi}}{\alpha_{\perp}^{\Phi}} = \frac{2K}{(2K+1)\frac{\alpha_0^{\Phi}}{\alpha_{\infty}^{\Phi}} - 1} = \frac{2K}{(2K+1)\frac{\alpha_0 - \alpha_{(6)}^e}{\alpha_{\infty} - \alpha_{(2)}^e} - 1} \quad (6)$$

(де $\alpha_{\parallel}^{\Phi}$, α_{\perp}^{Φ} — фононні складові термо-ЕРС захоплення вздовж і поперек довгої осі ізоенергетичного еліпсоїда відповідно; α_0^{Φ} і α_{∞}^{Φ} — фононні складові термо-ЕРС, виміряні в недеформованому і пружно деформованому кристалі; α_0 і α_{∞} — значення термо-ЕРС в недеформованих і в деформованих зразках відповідно; $\alpha^e = \frac{k}{e} \left[2 + \ln \frac{2(2\pi m^* kT)^{3/2}}{n_0 h^3} \right]$ — електронна (дифузійна) складова термо-ЕРС (формула Писаренка) [13]; n_0 — концентрація носіїв заряду; e — заряд електрона; k — стала Больцмана; T — температура; h — стала Планка; $m^* = N^{2/3} \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp}^2}$ — ефективна маса густини станів; N — число ізоенергетичних еліпсоїдів) можуть проявляти чутливість до термічної передісторії досліджуваних кристалів. Саме з урахуванням цієї обставини описані в даній роботі досліди були виконані на зразках, виготовлених із одного і того ж зливка, що певною мірою гарантувало тотожність їх термічної передісторії.

На закінчення можна зробити такі висновки.

1. У широкому інтервалі концентрацій носіїв заряду $1 \cdot 10^{12} \leq n_e \equiv N_I \leq 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при $T = 77,4 \text{ К}$ в дослідах з n -Si знайдено граничні значення тензоопору $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ залежно від n_e . З'ясовано, що досліджена функція має чітко виражений мінімум в області $n_e \approx 10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$, виникнення якого зумовлене проявом початку виродження електронного газу, пов'язаного з достатньою для цього концентрацією n_e .

2. Виявлений мінімум дослідженої функції характеризує початок перекриття домішкової зони з нижньою межею зони провідності.

3. Експериментально отримана залежність $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ дозволяє проводити розрахунки параметра анізотропії рухливості $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau}$ (а отже, і $K_{\tau} = K_m/K$) для області азотних температур і використаного в досліді діапазону n_e в припущенні, що $n_e = N_I \equiv N_{\text{донорів}}$, тобто, що досліджувані кристали є практично не компенсованими.

1. Мильвідский М. Г. Полупроводниковый кремний на пороге XXI века // Изв. вузов. Материалы электрон. техники. – 2000. – № 1. – С. 1–14.
2. Thompson S. E., Sun G., Choi Y. S., Nishida T. Uniaxial process induced strained Si: Extending the CMOS Roadmap // IEEE Transactions on Electron Devices. – 2006. – **53**, No 5. – P. 1010–1020.
3. Герасименко Н. Н., Пархоменко Ю. Н. Кремний – материал нанoeлектроники. – Москва: Техносфера, 2007. – 352 с.
4. Restrepo O. D., Varga K., Pantelides S. T. First principles calculations of electron mobilities in silicon: Phonon and Coulomb scattering // Appl. Phys. Lett. – 2009. – **94**, No 21. – P. 212103–212105.
5. Murphy A. F., Fagas G., Greer J. C. Deformation potentials and electron-phonon coupling in silicon nanowires // Nano Lett. – 2010. – **10**, No 3. – P. 869–873.
6. Niquet Y. M., Delerue C., Krzeminski C. Effects of strain on the carrier mobility in silicon nanowires // Ibid. – 2012. – **12**, No 7. – P. 3545–3550.
7. Herring C. Transport properties of a many valley semiconductor // Bell System Techn. J. – 1955. – **34**, No 2. – P. 237–290.
8. Электрические и гальваномагнитные явления в анизотропных полупроводниках / Под ред. П. И. Баранского. – Киев: Наук. думка, 1977. – 270 с.
9. Samuelsen M. R. Deformation potential constants for electrons in silicon and germanium from cyclotron resonance experiments // Phys. stat. sol. (b). – 1971. – **43**, No 1. – P. K83–K86.
10. Hensel J. C., Hasegawa H., Nakayama M. Cyclotron resonance in uniaxially stressed silicon. II. Nature of the covalent bond // Phys. Rev. – 1965. – **138**. – P. A225–A238.
11. Баранський П. І., Венгер Є. Ф., Гайдар Г. П. З'ясування причин зниження параметра анізотропії $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel}$ в n -Ge при підвищеному внеску домішкового розсіяння // Доп. НАН України. – 1999. – № 9. – С. 84–86.
12. Баранский П. И. Нетрадиционные механизмы пьезосопротивления в одноосно деформированных многодолинных полупроводниках // Неорган. материалы. – 1997. – **33**, № 2. – С. 147–152.
13. Стильбанс Л. С. Физика полупроводников. – Москва: Сов. радио, 1967. – 452 с.

Інститут фізики напівпровідників
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України, Київ
Інститут ядерних досліджень НАН України, Київ

Надійшло до редакції 16.01.2013

П. И. Баранский, В. М. Бабич, Г. П. Гайдар

Концентрационная зависимость тензосопротивления монокристаллов n -Si

В широком интервале концентраций носителей заряда $10^{12} \leq n_e \equiv N_I \leq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ при $T = 77,4 \text{ K}$ в опытах с монокристаллами n -Si экспериментально получена зависимость предельных значений тензосопротивления $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ от n_e , которая позволяет проводить расчеты параметра анизотропии подвижности $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau}$ (а следовательно, и параметра анизотропии рассеяния $K_{\tau} = K_m/K$) для области азотных температур в предположении, что исследуемые кристаллы являются практически не компенсированными. Объяснено наличие минимума на зависимости $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ в области $n_e \approx 10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

P. I. Baranskii, V. M. Babich, G. P. Gaidar

The concentration dependence of the tensorresistance of n -Si single crystals

In a wide range of concentrations of charge carriers $10^{12} \leq n_e \equiv N_i \leq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ at $T = 77.4 \text{ K}$ in the experiments with the single crystals of n -Si, the dependence of the limit values of tensorresistance $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0$ on n_e , which allows us to calculate the anisotropy parameter of mobility $K = \mu_{\perp}/\mu_{\parallel} = K_m/K_{\tau}$ (and, hence, the anisotropy parameter of scattering $K_{\tau} = K_m/K$) for the region of liquid nitrogen temperatures in the assumption that the investigated crystals are almost uncompensated, is experimentally obtained. The presence of a minimum on the dependence $\rho_{\infty}^{[100]}/\rho_0 = f(n_e)$ in the region of $n_e \approx 10^{17} \div 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ is explained.



УДК 536.423+532.528

Академик НАН Украины А. А. Долинский, Ю. А. Шурчкова

Вода в условиях обработки путем дискретно-импульсного ввода энергии

Исследованы свойства воды при обработке по термовакуумной технологии: физические и теплофизические параметры, химические преобразования в примесях, изменение водородного показателя в диапазоне температур от 4 до 100 °С при десятикратном перепаде давлений и перегревах до 50 °С. Установлено изменение электропроводности, удельной теплоты парообразования, кинематической вязкости, химического состава и структуры примесей, величины водородного показателя (рН). Показатель (рН) изменялся в пределах от 6,8–7 до 9–9,2 и сохранялся без изменений до двух лет. Для объяснения полученных результатов выдвинута гипотеза на основе поляризационной модели структуры воды.

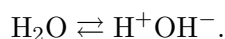
Дискретно-импульсный ввод энергии (ДИВЭ) в гетерогенные среды определяет пути прямого преобразования непрерывно вводимой в аппарат энергии в кратковременные импульсы высокой мощности, дискретно распределенные в рабочем объеме [1].

Термовакуумная технология обработки жидкостей разработана в Институте технической теплофизики НАН Украины. Она построена на механизмах ДИВЭ, в ней используются процессы адиабатного вскипания и кавитации при резких перепадах давления в сочетании с нагревом и охлаждением потока жидкости [2, 3].

Вода в данной работе рассматривается как субстанция, существующая в природе со свойственными ей примесями и включениями.

Термовакуумная технология при обработке жидкостей позволяет получать ряд новых эффектов. Так, при обработке воды получены существенные изменения состава и структуры примесей, а также аномально высокие значения водородного показателя (рН).

Водородный показатель определяется наличием в воде противоположно заряженных ионов H^+ и OH^- , так как вода способна диссоциировать [4]



В равновесном состоянии при равенстве концентраций ионов H^+ и OH^- вода обладает нейтральной реакцией. При нарушении равновесия при избыточной концентрации ионов

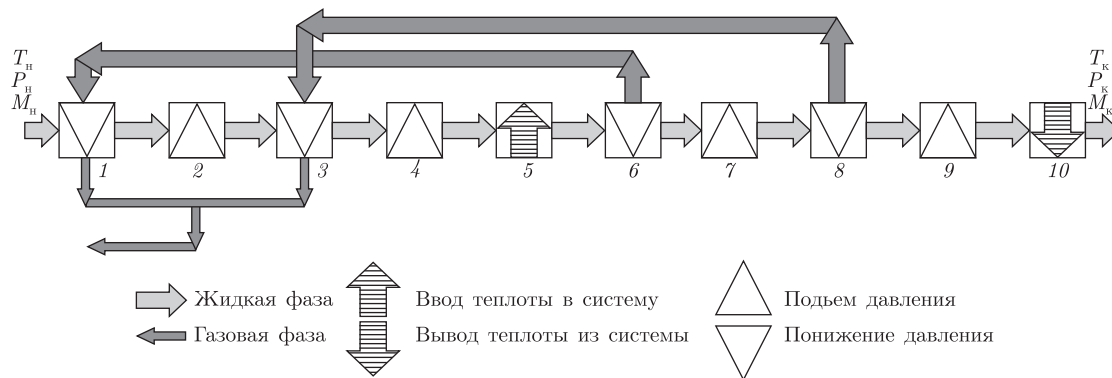


Рис. 1. Термовакuumная технология обработки жидкостей: 1, 3 — конденсация; 2, 4, 7, 9 — повышение давления; 5 — ввод теплоты в систему; 6, 8 — испарение; 10 — отвод теплоты из системы

H^+ она имеет кислую реакцию, при избыточной концентрации ионов OH^- — щелочную. Причиной нарушения равновесия могут быть либо химические взаимодействия с примесями воды, либо физические воздействия на структуру воды. Химические взаимодействия определяются присутствием в воде примесей, способных соединяться с ионами H^+ и OH^- . Внешние воздействия на воду в виде различного рода полей, замораживания с последующим размораживанием и т. д. также способствуют изменению водородного показателя. Наиболее существенные его изменения наблюдаются при жесткой акустической кавитации, когда происходит разрушение молекулы воды с разрывом ковалентных связей и образованием новых соединений: H^* , OH^* , H^+ , OH^- , O , H_2 , H_2O_2 в момент схлопывания кавитационных пузырьков при возникновении закритических режимов с высокими значениями температуры и давления. До конца этот механизм не изучен, но существует достаточно большое количество экспериментальных данных, подтверждающих это явление [5–11]. В [11] приводятся экспериментальные данные обработки воды жесткой акустической кавитацией, в результате которой показатель pH возрастал до значений 8–8,1 и сохранялся от нескольких секунд до нескольких часов.

Принципиально новым результатом в наших экспериментах является то, что при обработке по термовакuumной технологии показатель pH сохраняется более двух лет. Это говорит о том, что в воде постоянно поддерживается избыточная концентрация ионов OH^- и отсутствуют свободные ионы H^+ .

Водородный показатель может определять течение многих химических, технологических и биологических процессов, поэтому изучение этого явления представляет как научный, так и практический интерес.

Описание термовакuumной технологии обработки жидкостей. Термовакuumная технология представляет собой ряд последовательных взаимосвязанных процессов в потоке жидкости: диспергирование, конденсация, нагрев, охлаждение, кипение, испарение, насосное перекачивание с возможными эффектами кавитации (см. рис. 1).

В технологии применяется процесс адиабатного вскипания, когда предварительно аккумулярованная в жидкости внутренняя энергия реализуется при истечении потока перегретой жидкости через диафрагму или насадок в виде растущих с высокой скоростью паровых пузырьков, которые на коротком отрезке пути трансформируют жидкостный поток в парожидкостный с образованием пузырьковой, а затем пленочной структуры. Тонкие пленки на выходе из насадка разрушаются с образованием мелких капель размером в несколько мкм

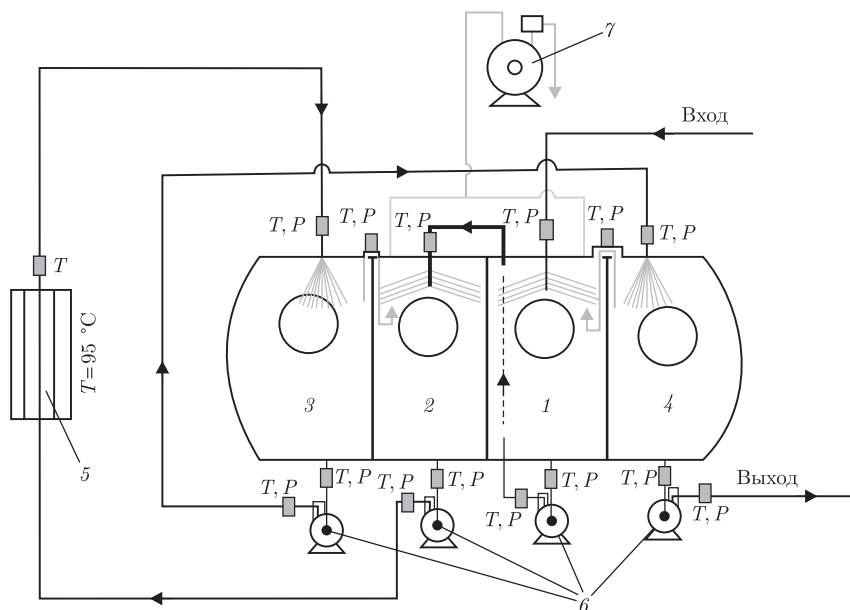


Рис. 2. Принципиальная схема аппарата для обработки жидкости: 1–4 — вакуумные камеры; 5 — теплообменник для нагрева жидкости; 6 — центробежные насосы; 7 — вакуумный насос; T, P — датчики для измерения температуры и давления, соответственно

и нм. В процессе роста пузырьков происходит непрерывное обновление поверхности раздела фаз. Эти динамические процессы протекают во временном масштабе наносекунд. В межпузырьковом пространстве возникает сложная гидродинамическая обстановка с образованием макро- и микровихрей, высокой турбулизацией жидкости и высокими сдвиговыми напряжениями. С поверхности образовавшихся мелких капель идет процесс испарения со скоростью, близкой к скорости испарения в вакууме, и также с обновлением поверхности раздела фаз. Образовавшийся пар подается в область диспергированной охлажденной жидкости, где он конденсируется на поверхности капель и пленок.

Описание экспериментальной базы. Эксперименты проводились на технологической линии с использованием специально разработанного аппарата, в котором реализуется термовакуумная технология. Принципиальная схема аппарата представлена на рис. 2.

Охлажденная вода в диспергированном состоянии непрерывно подается последовательно в 1-ю и 2-ю камеры аппарата, где поддерживается заданное разрежение. Затем вода подается в теплообменник для подогрева до заданной температуры и поступает последовательно в 3-ю и 4-ю камеры, где также поддерживается разрежение, после чего поступает в теплообменник для охлаждения. Датчики температуры и давления были установлены в точках, указанных на рис. 2.

Исследования проводились в диапазоне температур от 4 до 100 °С при десятикратном перепаде давлений от 1 до 0,1 ат; перегрев воды относительно температуры насыщения достигал 50 °С.

В экспериментах использовалась вода из скважин различных регионов.

Исследовали изменение физических и теплофизических параметров воды; химические преобразования в примесях воды, их структуру и фракционный состав; изменение водородного показателя (рН) в зависимости от величины перегрева воды в потоке, по этапам обработки и от времени хранения.

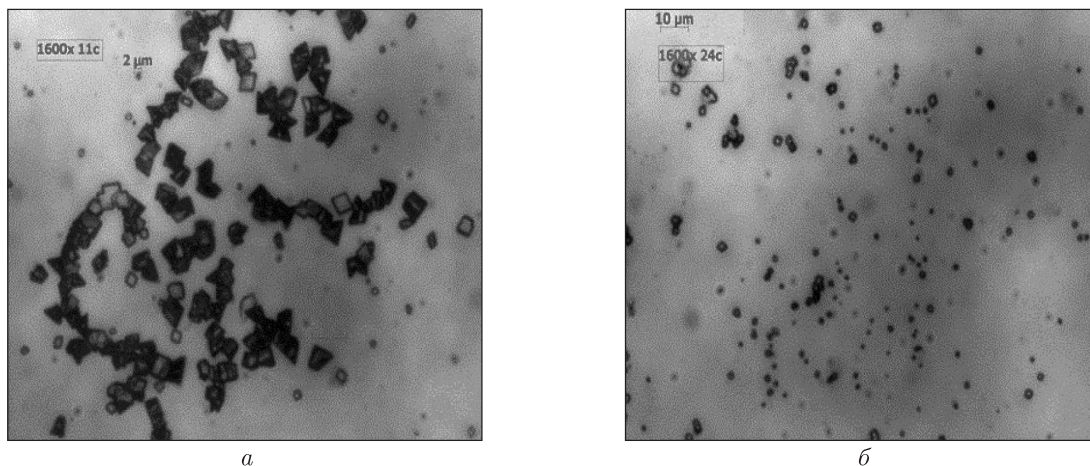


Рис. 3. Изменение микроструктуры сухого остатка (увеличение $\times 1600$): *a* — вода исходная; *б* — вода обработанная

Результаты экспериментов. В результате исследований установлено следующее.

1. При обработке воды по термовакuumной технологии изменяется ряд физических и теплофизических параметров: электропроводность, гальванический ток, удельная теплота парообразования, кинематическая вязкость, неизменным остается окислительно-восстановительный потенциал (табл. 1). Анализы проводились совместно с Институтом физики НАН Украины.

2. Изменяется химический состав примесей исходной воды. Анализы проводились по 17 параметрам, согласно действующим Государственным нормативам в сертифицированной лаборатории Украинского научно-исследовательского института спирта и биотехнологий продовольственных продуктов. Результаты приведены в табл. 1.

Как видно, уменьшаются общая жесткость, общая щелочность, массовая концентрация гидрокарбонатов. Изменяется микроструктура и фракционный состав примесей, которые определялись по сухому остатку: повышается дисперсность и структура (см. рис. 3).

3. Наиболее существенно изменяется величина водородного показателя (рН). В экспериментах она достигала значений 9–9,2 при исходном значении 6,8–7.

Было установлено, что рН изменяется по этапам обработки. На первом–втором этапах в камерах аппарата 1–2 (см. рис. 2) наблюдается некоторое повышение показателя. При нагревании в теплообменнике после камер 1, 2 рН незначительно снижается. Основное

Таблица 1. Изменение физико-химических показателей воды при обработке по термовакuumной технологии

| Параметры | Вода исходная | Вода, обработанная при 80 °С |
|-----------------------------------------------------------|-------------------------|------------------------------|
| Электропроводность, мкС | 501 | 428 |
| Окислительно-восстановительный потенциал, мВ | +221 | +221 |
| Гальванический ток, с. е. | 125 | 115 |
| Удельная теплота испарения, Дж/кг | 2187,22 | 2265,86 |
| Вязкость кинематическая, м ² /с | $1,01543 \cdot 10^{-6}$ | $1,01080 \cdot 10^{-6}$ |
| Общая жесткость, ммоль/дм ³ | 4,4 | 2,85 |
| Общая щелочность, ммоль/дм ³ | 5,4 | 3,92 |
| Массовая концентрация гидрокарбонатов, мг/дм ³ | 351 | 300 |
| Водородный показатель, рН | 7,6 | 8,9 |

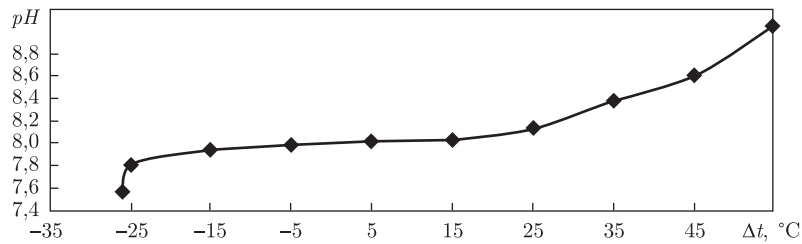


Рис. 4. Изменение водородного показателя в зависимости от перегрева воды

повышение рН наблюдается после камер вскипания 3, 4. Степень повышения зависит от уровня перегрева потока воды на входе в камеру 3 (см. рис. 2).

На рис. 4 показаны результаты экспериментов по определению зависимости величины рН от перегрева воды на входе в зону адиабатного вскипания — в камеру 3. При недогреве воды до температуры насыщения и при перегревах до 10–15 °С величина рН не изменяется и остается постоянной. С увеличением перегрева, по мере развития процесса адиабатного вскипания, начинается рост величины рН. Максимального значения в данной серии экспериментов она достигала 9,2 при перегреве 55 °С.

Были проведены длительные исследования изменения величины рН в процессе хранения. Герметично закрытые колбы с обработанной водой хранились при температуре 18–22 °С более двух лет. В течение этого времени величина рН практически не изменялась.

Анализ результатов экспериментов. В природе не существует абсолютно чистой воды. В ней всегда присутствуют примеси в виде газов, органических и неорганических соединений, которые определяют ряд ее свойств и течение многих реакций.

При обработке воды по термовакуумной технологии на первых двух этапах в результате вакуумирования и частичного подогрева удаляется значительная (до 50%) часть газовой составляющей примесей.

Наибольшей растворимостью в воде обладает углекислый газ, который образует с ней угольную кислоту [4]



которая диссоциирует



В результате в воде создается повышенная концентрация ионов H^+ . При удалении из воды углекислого газа реакции (1)–(3) сдвигаются влево с уменьшением концентрации свободных ионов H^+ . При этом уменьшаются массовая концентрация гидрокарбонатов, общая жесткость и общая щелочность и, как следствие, повышается значение рН.

Мы проанализировали и экспериментально проверили вклад CO_2 в изменение рН при обработке воды по термовакуумной технологии. Полное удаление CO_2 в сочетании с вакуумированием и нагревом приводит к изменению рН на 5–7% от конечного результата.

Повышение рН на 3, 4 этапах обработки определяется условиями протекания адиабатного вскипания: резкое падение давления определяет резкий фазовый переход с образованием

тонких пленок и мелких капель, с поверхности которых идет интенсивное испарение. Эти процессы приводят к аномально высокому и стойкому повышению показателя pH. Сравнение этой величины при различных способах обработки показывает, что при термовакuumной технологии она значительно выше, чем в результате удаления CO₂ и при жесткой кавитации.

Для объяснения полученных результатов выдвинута гипотеза на основе поляризационной модели структуры воды [12–14]. Известно, что молекула воды представляет собой диполь, содержащий положительный и отрицательный заряды на полюсах, что определяет ее способность к межмолекулярным взаимодействиям за счет водородных связей. Каждая молекула воды может образовывать водородную связь с четырьмя соседними молекулами, образуя ажурный сетчатый каркас. При определенных условиях в системе водородных связей могут возникать различного рода дефекты, в том числе возможно образование комплекса H₅O₂⁺, который состоит из двух молекул H₂O, связанных прочной короткой водородной связью. В результате образования таких комплексов освобождается ион OH⁻. В [15] описываются условия, необходимые для возникновения таких комплексов: низкие давления, нахождение воды в тонких пленках и наноразмерных объемах, резкие фазовые переходы. Сравнение условий, вызывающих дефекты в структуре воды, с условиями течения процессов в термовакuumной технологии показывает, что они во многом совпадают: низкие давления, резкие фазовые переходы, наноразмерные капли, тонкие пленки, интенсивная турбулизация и высокие сдвиговые напряжения в межпузырьковом пространстве при адиабатном вскипании. На основании этого можно утверждать, что причиной избыточной концентрации ионов OH⁻ в воде после обработки по термовакuumной технологии является образование комплексов H₅O₂⁺.

Таким образом, в данной работе приведены результаты исследований изменений свойств воды при обработке по термовакuumной технологии и гипотеза, объясняющая причину изменения водородного показателя.

Водородный показатель определяет течение многих химических, технологических и биологических процессов. В практической деятельности изменение pH достигается чаще всего путем ввода химических реагентов, что не всегда благоприятно сказывается на конечном результате. Представляемая технология позволяет получать воду с заданным pH без введения каких-либо добавок. Это может быть использовано во многих отраслях деятельности человека. Например, в бальнеологии, в частности, в гастроэнтерологии, когда длительное применение минеральной воды с высоким pH может привести к нежелательной минерализации организма, использование воды, обработанной по термовакuumной технологии, которая может иметь как угодно низкую минерализацию, не будет иметь нежелательных побочных эффектов. В пищевой, фармацевтической, микробиологической и медицинской промышленности она может быть использована в целом ряде технологических процессов. В энергетике может быть использована для нейтрализации кислых вод, в частности, продуктов сгорания природного газа.

Можно уверенно сказать, что представляемая технология имеет широкую перспективу применения в реальных технологиях.

Что касается научного аспекта работы, полученные экспериментальные данные расширяют представления о возможности изменения свойств воды за счет изменения ее структуры, возможно, подтверждает экспериментально ряд положений поляризационной модели структуры воды.

1. Долінський А. А., Іваницький Г. К. Тепломасообмен и гидродинамика в парожидкостных дисперсных системах. Теплофизические основы дискретно-импульсного ввода энергии. Проект "Наукова книга". – Киев: Наук. думка, 2008. – 381 с.
2. Шурчкова Ю. А. Адиабатное вскипание. Практическое использование. – Киев: Наук. думка, 1999. – 225 с.
3. Долінський А. А., Басок Б. И., Гулый С. И. и др. Дискретно-импульсный ввод энергии в теплотехнологиях. – Киев: Ин-т техн. теплофизики НАН Украины, 1966. – 204 с.
4. Глинка Н. Л. Общая химия. – Москва: Гос. научно-техн. изд-во хим. лит-ры, 2003. – 728 с.
5. Промтов М. А. Экспериментальное исследование импульсной акустической кавитации в аппарате типа гидродинамической сирены // Акустич. журн. – 1977. – 43. – № 4. – С. 566–569.
6. Полоцкий И. Г. Химическое действие кавитации // Журн. общей химии. – 1947. – 17, вып. 6. – С. 1048–1054.
7. Маляренко В. В., Гончарук В. В. Свободные радикалы, образующиеся при озонировании воды // Химия и технология воды. – 2002. – 24. – С. 3–21.
8. Исследование по развитой кавитации: Сб. науч. тр. – Новосибирск: Ин-т теплофизики СО АН СССР, 1976. – 144 с.
9. Федоткин И. М. Физические явления и эффекты в жидких средах, предсказание механизма их влияния на технологические процессы, применение в технике // Химич. машиностроение. – 1985. – Вып. 41. – С. 10–16.
10. Флинн Г. Физика акустической кавитации в жидкостях / Под ред. У. Мезона // Физич. акустика. – 1967. – Т. 1. Ч. Б. – С. 7–138.
11. Вітенько Т. М. Гідродинамічна кавітація у масообмінних хімічних і біологічних процесах. – Тернопіль: Вид-во Терноп. держ. техн. ун-ту ім. І. Пулюя, 2009. – 224 с.
12. Антонченко В. Я., Давыдов А. С., Ильин В. В. Основы физики воды. – Киев: Наук. думка, 1991. – 668 с.
13. Бродский А. И. Роль водородных связей в процессах переноса протона // Водородная связь. – 1964. – № 10. – С. 115–125.
14. Зацепина Г. Н. Физические свойства и структура воды. – Москва: Изд-во Моск. ун-та, 1998. – 184 с.
15. Антонченко В. Я., Ильин В. В., Маковский Н. Н., Полесья С. А. Молекулярно-статические характеристики тонких пленок воды при учете поляризуемости молекул // Докл. АН УССР. Сер. А. – 1985. – № 8. – С. 41–44.

*Институт технической теплофизики
НАН Украины, Киев*

Поступило в редакцию 27.02.2013

Академік НАН України А. А. Долінський, Ю. О. Шурчкова

Вода в умовах обробки шляхом дискретно-імпульсного введення енергії

Досліджено властивості води при обробці за термовакуумною технологією: фізичні та теплофізичні параметри, хімічні перетворення в домішках, зміна водневого показника в діапазоні температур від 4 до 100 °С при десятикратному перепаді тисків і перегрівих до 50 °С. Встановлено зміну електропровідності, питомої теплоти пароутворення, кінематичної в'язкості, хімічного складу та структури домішок, величини водневого показника рН. Показник рН змінювався в межах від 6,8–7 до 9–9,2 і зберігався без змін до двох років. Для пояснення отриманих результатів висунуто гіпотезу на основі поляризаційної моделі структури води.

Academician of the NAS of Ukraine **A. A. Dolinskiy, J. A. Shurchkova**

Water under the treatment by a discrete-pulse introduction of power

Properties of water under the treatment by the thermal vacuum technology are investigated: physical and thermophysical parameters, chemical transformations in impurities, and change of a hydrogen indicator in a range of temperatures from 4 to 100 °C at the tenfold difference of pressures and overheats to 50 °C. The changes in electric conductivity, galvanic current, specific heat of steam formation, kinematic viscosity, and change of a hydrogen indicator (pH) are established. The pH values increased from 6.8...7 to 9...9.2 and remained without changes till 2 years. To explain the results, the hypothesis based on the polarization model of the structure of water is proposed.



УДК 621.762

Я. Г. Тимошенко, М. П. Гадзира,
член-кореспондент НАН України Г. Г. Гнесін, Н. К. Давидчук,
В. Б. Галямін

Створення наноструктурованої перлітної сталі шляхом легування заліза наноконпозиційним порошком на основі нестехіометричного карбїду кремнію

Вивчено процеси формування композиційних матеріалів на основі заліза при використанні синтезованих дисперсних порошкових продуктів у системі SiC — Fe₂O₃ як лігатури. Виявлено, що отримані сплави мають структуру нанорозмірного перліту. Встановлено, що введення синтезованих дисперсних порошкових продуктів у розплав заліза сприяє високому рівню механічних характеристик, зокрема, показника межі плинності (1420–1790 МПа). Розглянуто вплив різних стадій термічної обробки на механічні характеристики створеного сплаву.

Одним із перспективних напрямів в області порошкової металургії є отримання матеріалів та виробів з субмікроструктурною структурою для досягнення в них високих показників фізико-механічних та експлуатаційних властивостей [1]. Підвищення механічних властивостей конструкційних матеріалів здійснюється за рахунок формування в них ультрадрібнозернистої структури з розміром зерна до 1 мкм [2]. Корозійностійка аустенітна сталь 12X18H10T після рівноканального кутового пресування при кімнатній температурі з розміром зерна 100 нм має межу плинності 1340 МПа, що фактично в 6 разів перевищує межу плинності цієї сталі після термообробки. При цьому пластичність зберігається на достатньо високому для такої міцності рівні $\delta = 27\%$ [3]. Тому мета даної роботи полягала у вивченні процесів формування структури високоміцного сплаву на основі заліза при використанні синтезованих дисперсних порошкових продуктів у системі SiC — Fe₂O₃ як лігатури, а також дослідження їх механічних характеристик.

Методика експерименту. Для формування металокомпозиційного матеріалу як вихідних компонентів використовували порошок залізо марки ПЖР4МЗ Броварського казенного заводу порошкової металургії (питома поверхня порошку 0,03–0,072 м²/г) та синтезований дисперсний порошок продукт у системі SiC — Fe₂O₃. Порошковий матеріал отримували з порошку нанорозмірного нестехіометричного карбїду кремнію (твердий розчин вуглецю в карбїді кремнію (SiC–C)) [3, 4], залізоокисного червоного пігменту (α -Fe₂O₃)

© Я. Г. Тимошенко, М. П. Гадзира, Г. Г. Гнесін, Н. К. Давидчук, В. Б. Галямін, 2013

(ТУ 6-10-2029-86) та дисперсного порошку спеченого концентрату залізної руди (СКЗР) Полтавського ГЗК у вигляді котунів (ТУ 14-9-385-92). Порошкові компоненти SiC–C, Fe₂O₃ та СКЗР змішували на установці “Санд” в керамічних барабанах з твердосплавними кульками (WC–Co), у середовищі дистильованої води впродовж 1 год. Співвідношення маси шихти до маси розмелювальних тіл становило 1 : 6.

Термічну обробку порошкових сумішей системи $x\text{SiC} - (100 - x)\text{Fe}_2\text{O}_3$, де $x = 10-90\%$, проводили в індукційній печі в середовищі проточного аргону при 1400 °С впродовж 1 год. Отриманий порошок матеріал гомогенізували на установці “Санд” 30 хв.

Формування металевих композитів здійснювали шляхом змішування порошкового заліза та синтезованого дисперсного порошкового матеріалу на вказаній установці впродовж 30 хв. Отримані порошкові суміші системи Fe – 3% лігатура (продукт взаємодії в системі SiC–C – Fe₂O₃ та (SiC–C) – СКЗР) плавлять в індукційній печі при 1700 °С 40 хв без захисного середовища, використовуючи шліф порошок оксиду алюмінію як засипку. Отримані сплави кували при 900 °С та прокатували на двохвалковому стані ИМ-3 до загальної деформації понад 80%. Відпал зразків проводили в печі опору при 700 °С впродовж 2 год з подальшим охолодженням разом з піччю.

Аналіз отриманих результатів. З даних рентгеноструктурного аналізу (табл. 1) випливає, що термічна обробка порошкових сумішей системи SiC–C – Fe₂O₃ призводить до формування гетерофазного складу. Закономірним є зменшення вмісту залишкового високодисперсного карбиду кремнію в порошкових продуктах, що пов'язано з відновлювальними процесами оксиду заліза.

При заміні оксиду заліза дисперсним порошком СКЗР (ТУ 14-9-385-92) істотних змін у формуванні фазового складу не відбувається (табл. 2) – термічна обробка того самого ступеня. Також реалізується процес повного відновлення заліза. Звертає на себе увагу значне збільшення вмісту SiO₂ у порівнянні з композиціями, отриманими з використанням порошку оксиду заліза (див. табл. 1). Підвищений вміст фази α-кristобаліту пояснюється складом СКЗР, який містить до 20% за масою оксиду кремнію (ТУ 14-9-385-92).

Таблиця 1. Фазовий склад продуктів взаємодії в системі SiC–C – Fe₂O₃ після термічної обробки

| Номер складу лігатури | Вихідний масовий склад композитів, % | Вміст фаз, % | | | | | |
|-----------------------|----------------------------------------------|--------------|------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------|---------------------------------|
| | | SiC | SiO ₂ | β-Si ₃ N ₄ | Si ₂ N ₂ O | Fe ₂ Si | Fe ₅ Si ₃ |
| 1 | 90 SiC–C – 10 Fe ₂ O ₃ | 62,1 | — | 26,4 | 4,5 | 5,1 | 1,9 |
| 2 | 80 SiC–C – 20 Fe ₂ O ₃ | 60,3 | — | 14,5 | 7,3 | 12,9 | 5,0 |
| 3 | 70 SiC–C – 30 Fe ₂ O ₃ | 56,4 | — | 8,1 | 9,2 | 19,0 | 7,3 |
| 4 | 60 SiC–C – 40 Fe ₂ O ₃ | 43,6 | — | 6,4 | 9,3 | 27,2 | 13,5 |
| 5 | 50 SiC–C – 50 Fe ₂ O ₃ | 33,8 | 14,7 | — | — | 33,1 | 18,4 |
| 6 | 40 SiC–C – 60 Fe ₂ O ₃ | 14,1 | 23,2 | — | — | 37,2 | 25,5 |

Таблиця 2. Фазовий склад продуктів взаємодії в системі SiC–C – СКЗР після термічної обробки

| Номер складу лігатури | Вихідний масовий склад композитів, % | Вміст фаз, % | | | | | | | |
|-----------------------|--------------------------------------|--------------|------------------|----------------------------------|--------------------|---------------------------------|-----|--------------------|--------------------------------|
| | | SiC | SiO ₂ | Si ₂ N ₂ O | Fe ₂ Si | Fe ₅ Si ₃ | FeO | Fe ₃ Si | Fe ₇ C ₃ |
| 1* | 90 SiC–C – 10 СКЗР | 80,1 | 4,0 | 9,5 | 2,8 | 3,6 | — | — | — |
| 2* | 80 SiC–C – 20 СКЗР | 74,2 | 9,3 | — | 9,6 | 6,9 | — | — | — |
| 3* | 70 SiC–C – 30 СКЗР | 58,3 | 11,8 | — | 12,9 | 11,7 | 5,3 | — | — |
| 4* | 60 SiC–C – 40 СКЗР | 42,0 | 22,2 | — | 14,0 | 16,1 | 5,7 | — | — |
| 5* | 50 SiC–C – 50 СКЗР | 31,1 | 25,4 | — | 14,5 | 22,3 | 6,7 | — | — |
| 6* | 40 SiC–C – 60 СКЗР | 23,8 | 28,3 | — | 15,3 | 25,9 | 6,7 | — | — |

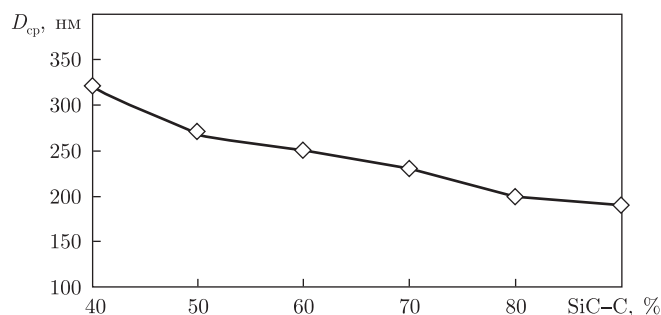


Рис. 1. Залежність середнього розміру диспергованих частинок продуктів взаємодії в системі SiC–C – Fe₂O₃ після термічної обробки від масового вмісту порошку (SiC–C)

Подрібнення продуктів взаємодії після термічної обробки в планетарному млині призводить до формування дисперсного стану (рис. 1). Як видно з рисунку, зменшення середнього розміру частинок спостерігається в порошкових продуктах із зростанням вмісту SiC–C.

Сформовані з порошкового заліза та синтезованого дисперсного порошкового продукту в системі SiC–C – Fe₂O₃ та SiC–C – СКЗР суміші брикетувались у сталій прес-формі для їх подальшого розміщення в графітовому тиглі з використанням засипки із шліф порошку оксиду алюмінію. Завдяки такій методиці вдалося отримати однорідні за структурою злитки з гладкою поверхнею.

Для виявлення впливу частки карбіду кремнію в складі лігатури на формування властивостей сплавлених зразків було проведено дослідження з використанням продукту, утвореного в системі $x(\text{SiC–C}) - (100 - x)\text{Fe}_2\text{O}_3$, де $x \geq 40\%$.

Як видно з рис. 2, *a* показник межі плинності композиційних матеріалів, що пройшли стадії гарячого кування та холодного прокатування, прямо пропорційний масовому вмісту SiC в лігатурі (див. табл. 1). Початок графіка (крива 1) свідчить про майже однаковий вміст SiC–C у складі лігатури № 1 й № 2. Різкий хід кривої вниз спостерігається з 3 до 6 складу включно. Це пов'язано зі зниженням вмісту SiC–C в складі лігатур. Залежно від складу лігатури межа плинності змінюється в інтервалі 1420–1790 МПа. Відомо, що при холодній прокатці сталі зі збільшенням ступеня деформації підвищуються всі характеристики міцності: межа плинності, міцності та твердість [5].

Аналогічна залежність показника межі плинності від вмісту SiC у складі лігатур, що утворені в системі SiC–C – СКЗР, проявляється ходом кривої 2 на рис. 2, *a*. Більш високий показник межі плинності для зразка № 2* відносно зразка № 1* зумовлений меншим вмістом оксидних фаз (див. табл. 2). Для зразка № 1* загальний вміст оксидних фаз становить 13,5%, а для зразка № 2* – 9,3%. Незважаючи на 80,1% вміст карбіду кремнію у складі лігатури № 1*, що на 6% більше, ніж у складі лігатури зразка № 2*, все ж таки рівень межі плинності поступається за рахунок ефективнішого сприйняття розплавом заліза без оксидних складових лігатури. Загальний вміст таких фаз різний для зразків № 1* й № 2* і становить 86,5 й 90,7% відповідно. Це може бути причиною переваги значення межі плинності.

Рентгенофазовий аналіз сплавлених зразків показав, що вони складаються з однієї фази фериту $\alpha\text{-Fe}$. Значення параметра ґратки цієї фази ($a = 0,28716 \text{ нм}$) на 0,3% більше за параметр ґратки нормального фериту (0,28620 нм), що свідчить про формування твердого розчину вуглецю та кремнію в залізі. Як відомо, навіть при швидкому нагріві зразків чистого Fe до 1400–1500 °C ще до його розплавлення в місці контакту з SiC утворюється рідка

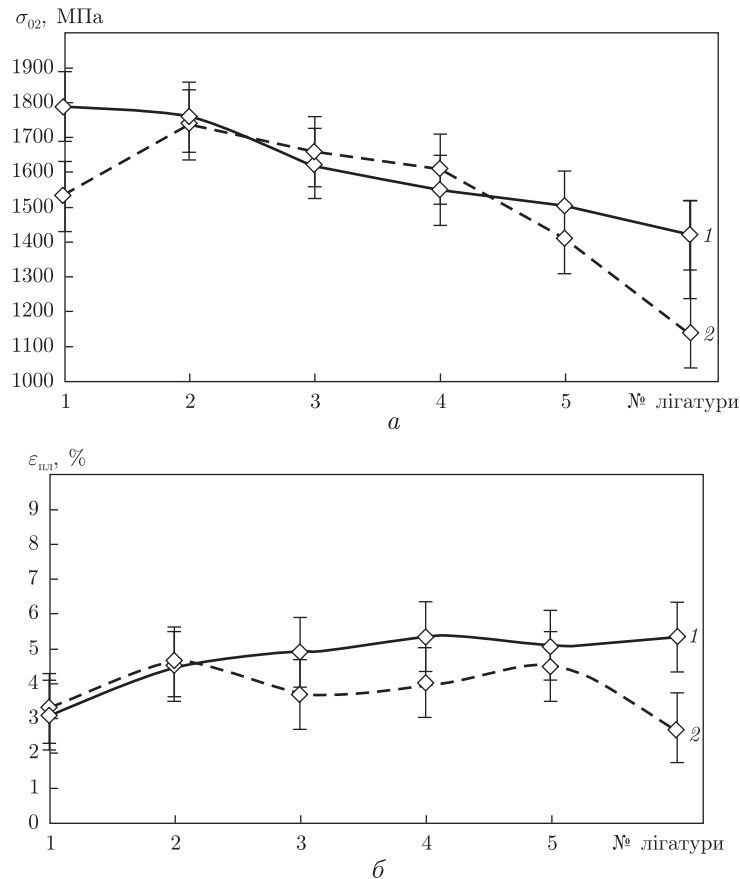


Рис. 2. Залежність межі плинності (а) та коефіцієнта пластичності (б) зразків системи Fe — 3% лігатура від вмісту SiC у складі лігатури:
Система: SiC—C — Fe₂O₃ (1); SiC—C — СКЗР (2)

фаза в результаті дифузійного насичення металу кремнієм і вуглецем. Ця рідка фаза добре змочує поверхню SiC. При повному розплавленні металу відбувається енергійне розчинення карбиду кремнію [6]. В процесі формування злитку відбувається повна розчинність усіх складових фаз лігатури, що в подальшому спричинює формування зародків кристалізації з одночасним утворенням високодисперсного евтектоїдного структурного стану. Саме такий стан обумовлений вмістом вуглецю і його розподілом у структурі зразків.

Значення коефіцієнта пластичності холоднокатаних зразків системи Fe — 3% лігатура (див. б на рис. 2) зростає зі зменшенням показника межі плинності. Як відомо, при деформації металів відбувається їх зміцнення за рахунок створення розгалуженої сітки дислокацій або стінок в результаті чого показники міцності підвищуються, а показники пластичності знижуються [7]. Найбільше значення коефіцієнта пластичності становить 5,4% для зразка, що характеризується межею плинності 1550 МПа. Менші показники коефіцієнта пластичності (крива 2) (див. б на рис. 2) для зразків, що були утворені з використанням лігатури з участю меленого СКЗР, пов'язані із вмістом оксиду кремнію до 20% у вихідному складі (ТУ 14-9-385-92).

Проведення холодної ущільнюючої прокатки композиційних матеріалів системи Fe — 3% лігатура підвищує показники межі плинності майже на 400 МПа у порівнянні зі зразками

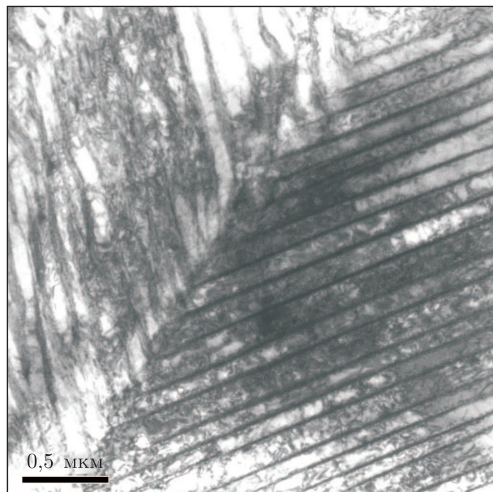


Рис. 3. Фрагмент мікроструктури (ПЕМ) кованиго та холоднокатаного зразка з вмістом 3% лігатури, утвореного за участю складу лігатури № 1

після гарячого кування. Відпал кованих та холоднокатаних зразків при температурі 700 °С впродовж 2 год призводить до значного зниження межі плинності. Згідно табл. 3, таке зниження відбувається майже вдвічі в порівнянні до значень межі плинності для зразків, що не проходили стадію відпалу. Слід зазначити, що температура відпалу не перевищувала температуру переходу α -Fe у γ -Fe, тобто всі релаксаційні процеси у структурі проходили в умовах стабільності фази фериту. За даними [8], межа плинності перлітної сталі 60Г після відпалу з тонкопластинчастою структурою становить 790 МПа, що майже вдвічі перевищує межу плинності сталі з грубопластинчастою (400 МПа) структурою.

Дослідження мікроструктури кованих та холоднокатаних металокомпозитів системи Fe — 3% лігатура (рис. 3) з різним складом лігатури істотних відмінностей у структурі зразків не виявило. Загальною характеристикою є прояв типового контрасту, що пов'язаний із структурою високодисперсного перліту. Карбідні пластинчасті утворення спостерігаються на всіх ділянках структури. Також виявлена їх переважна орієнтація в межах малих за розміром об'ємах, які для зразка з вищим значенням межі плинності є дещо меншими (див. рис. 3).

Холодне прокатування попередньо кованих зразків призводить до утворення на зображеннях характерного контрасту, що зумовлений наявністю в структурі дислокаційних сіток та стінки. Також є прояв високодисперсної перлітної структури (рис. 4).

Таблиця 3. Межа плинності зразків системи Fe — 3% лігатура після різних стадій термічної обробки (гаряче кування, холодна прокатка та відпал)

| Склад сплавлених зразків | Ковані композиц. матеріали | Ковані та холоднокатані | Ковані, холоднокатані та відпалені |
|-----------------------------|----------------------------|-------------------------|------------------------------------|
| 3% (лігатура № 1) — 97% Fe | 1387 | 1790 | 912 |
| 3% (лігатура № 3) — 97% Fe | 1217 | 1626 | 750 |
| 3% (лігатура № 4) — 97% Fe | 1177 | 1542 | 640 |
| 3% (лігатура № 2*) — 97% Fe | 1330 | 1738 | 757 |
| 3% (лігатура № 3*) — 97% Fe | 1251 | 1650 | 652 |
| 3% (лігатура № 4*) — 97% Fe | 1139 | 1640 | 631 |

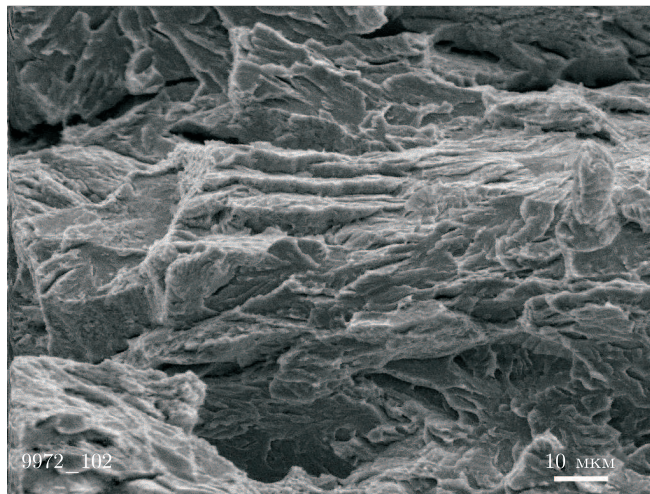


Рис. 4. Фрагмент мікроструктури (РЕМ злому поверхні) кованого та холоднокатаного зразка з вмістом 3% лігатури, утвореного за участю складу лігатури № 1

Проведення холодної ущільнюючої прокатки кованих композиційних матеріалів системи Fe — 3% лігатура сприяє підвищенню механічних характеристик майже в 2 рази в порівнянні з промисловою тонколистовою вальцьованою конструкційною вуглецевою сталлю звичайної якості Ст3сп (див. табл. 4). За міцністю створені композити не поступаються високоміцній арматурній сталі, що проходить стадію спеціальної термічної обробки.

Таким чином за результатами дослідження можна зробити такі висновки.

Формування композиційних матеріалів на основі заліза з використанням синтезованих дисперсних порошкових продуктів у системі SiC — Fe₂O₃ як лігатури проходить з повним розчиненням легуючих компонентів та формуванням однорідної феритної структури.

Механічні характеристики композиційних матеріалів системи Fe — 3% лігатура залежать від масового вмісту SiC у лігатурі. Проведення холодного прокатування кованих композиційних матеріалів Fe — 3% лігатура сприяє підвищенню показників межі плинності від 1420 до 1790 МПа залежно від складу лігатури. Відпал цих зразків призводить до зниження межі плинності майже вдвічі.

Композиційні матеріали системи Fe — 3% лігатура мають структуру нанорозмірного перліту. Холодне прокатування попередньо кованих зразків призводить до утворення на зображеннях злому характерного контрасту, що зумовлений наявністю в структурі дислокаційних сіток та текстурованих зерен фериту.

Таблиця 4. Порівняльні характеристики механічних властивостей промислових листових, арматурних сталей та металокомпозитів, отриманих шляхом введення в залізну матрицю порошкової лігатури складу № 2 та № 6

| Сплав, % за масою | Межа плинності, МПа | Межа міцності, МПа | Мікротвердість, ГПа |
|----------------------------|------------------------|-----------------------|------------------------|
| Ст3сп | 235 | 530 | 1,32 |
| Ст5сп | 255 | 680 | — |
| В500С | 600 | 700 | — |
| Ат1000 | 1000 | 1250 | — |
| 97% Fe — 3% лігатура (№ 2) | 1760 | 2000 | 4,90 |
| 97% Fe — 3% лігатура (№ 6) | 1420 | 1653 | 3,94 |

1. Гусев А. И., Ремпель А. А. Нанокристаллические материалы. – Москва: Физматлит, 2001. – 224 с.
2. Meyers M. A., Mishra A., Benson D. J. Mechanical properties of nanocrystalline materials // Progr. Mater. Sci. – 2006. – **51**. – P. 427–556.
3. Gadzyra M. P., Gnesin G. G., Mykhaylyk O. O., Andreyev O. V. Synthesis and structural peculiarities of nonstoichiometric β – SiC // Diamonds and Related Materials. – 1998. – **7**. – P. 1466–1470.
4. Гадзыра Н. Ф., Гнесин Г. Г., Михайлик А. А. Механизм образования твердого раствора углерода в карбиде кремния // Порошк. металлургия. – 2001. – № 9./10. – С. 15–18.
5. Диомидов Б. Б., Литовченко Н. В. Технология прокатного производства. – Москва: Металлургия, 1979. – 488 с.
6. Гнесин Г. Г. Карбидокремниевые материалы. – Москва: Металлургия, 1977. – 216 с.
7. Виноградов Г. А., Семенов Ю. Н., Катрус О. А., Каташинский В. П. Прокатка металлических порошков. – Москва: Металлургия, 1969. – 382 с.
8. Изотов В. И., Поздняков В. А., Лукьяненко Е. В. и др. Влияние дисперсности перлита на механические свойства, деформационное поведение и характер разрушения высокоуглеродистой стали // Физика металлов и металловедение. – 2007. – **13**, № 5. – С. 549–560.

Інститут проблем матеріалознавства
і.м. І. М. Францевича НАН України, Київ

Надійшло до редакції 08.04.2013

Я. Г. Тимошенко, Н. Ф. Гадзыра,
член-корреспондент НАН України **Г. Г. Гнесин, Н. К. Давидчук,**
В. Б. Гальямин

**Создание наноструктурной перлитной стали путем легирования
железа наноконпозиционным порошком на основе
нестехиометрического карбида кремния**

Изучены процессы формирования композиционных материалов на основе железа при использовании синтезированных дисперсных порошковых продуктов в системе SiC – Fe₂O₃ в качестве лигатуры. Обнаружено, что полученные сплавы имеют структуру наноразмерного перлита. Установлено, что введение синтезированных дисперсных порошковых продуктов в расплав железа способствует высокому уровню механических характеристик, в частности, показателя предела текучести (1420–1790 МПа). Рассмотрено влияние различных стадий термической обработки на механические свойства созданного сплава.

Ya. G. Tymoshenko, M. P. Gadzyra,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **G. G. Gnesin, N. K. Davydchuk,**
V. B. Galyamin

**Creation of nanostructured pearlitic steel by the alloying of iron by a
nanocomposite powder on the base of non-stoichiometric silicon carbide**

The processes of formation of Fe-based composite materials with the use of synthesized dispersed powder products in the system SiC – Fe₂O₃ as alloy are studied. It is found that the obtained alloys have structure of nanosized pearlite. It is established that the introduction of the synthesized dispersed powder products to melted iron favors a high level of the mechanical characteristics, in particular, the yield strength (1420–1790 MPa). The influences of the various stages of heat treatment on the mechanical properties of the alloy are examined.



УДК 550.42

Член-корреспондент НАН Украины Р. Я. Белевцев

О термодинамическом анализе изотопного обмена в воде гидросферы и земной коры

Для оценки физико-химических условий геохимических процессов в гидросфере и земной коре предложен термодинамический анализ изотопного обмена в воде, благодаря которому по константе распределения изотопных растворов, свободной энергии и энтропии можно определять температуру и давление при метеорных и гидротермальных процессах. По энтропии смешения изотопных растворов рассчитан состав устойчивых молекул тяжелой воды и объяснена позитивная корреляция между содержанием дейтерия (D) и ^{18}O в метеорной воде. Подземные воды и гидротермальный рудоносный флюид также имеют метеорное происхождение. Содержание D в воде увеличивается в ряду: газ — жидкость — лед с повышением температуры и давления в реакциях окисления и ошелачивания, а уменьшается при биогеохимических процессах, взаимодействии с водородом, метаном и органическими веществами (в живых организмах, торфе, угле, нефти и горючем газе).

Для оценки физико-химических условий геохимических процессов в окружающей среде большую и новую информацию может дать термодинамический анализ широко распространенных изотопных систем. Прежде всего это касается веществ с изотопами легких элементов — водорода, кислорода, углерода, серы и других элементов от лития до свинца и урана с учетом характера, условий и эволюции таких геохимических процессов во внешних геосферах — атмосфере, гидросфере, земной коре, как формирование геохимических ландшафтов, водообмен в поверхностных и подземных водах, техногенез, выветривание, осадкообразование, рудообразование, а также процессов в биогеохимии, метеорологии. Самым распространенным и активным компонентом в этих взаимодействиях является вода, имеющая метеорное происхождение [1]. По этой причине изотопному обмену в воде гидросферы и земной коры будет уделено основное внимание в настоящем сообщении.

Изотопные системы как растворы. Разные изотопы можно рассматривать и как разные элементы, поскольку содержащие их вещества отличаются по физическим и химическим свойствам [2]. Поэтому большинство веществ можно считать многокомпонентными изотопными идеальными растворами, в которых тяжелые изотопы составляют доли процентов, редко первые проценты. Например, жидкая вода (ж) и водный пар (газ (г)) являются четырехкомпонентным многовариантным идеальным раствором преобладающего

© Р. Я. Белевцев, 2013

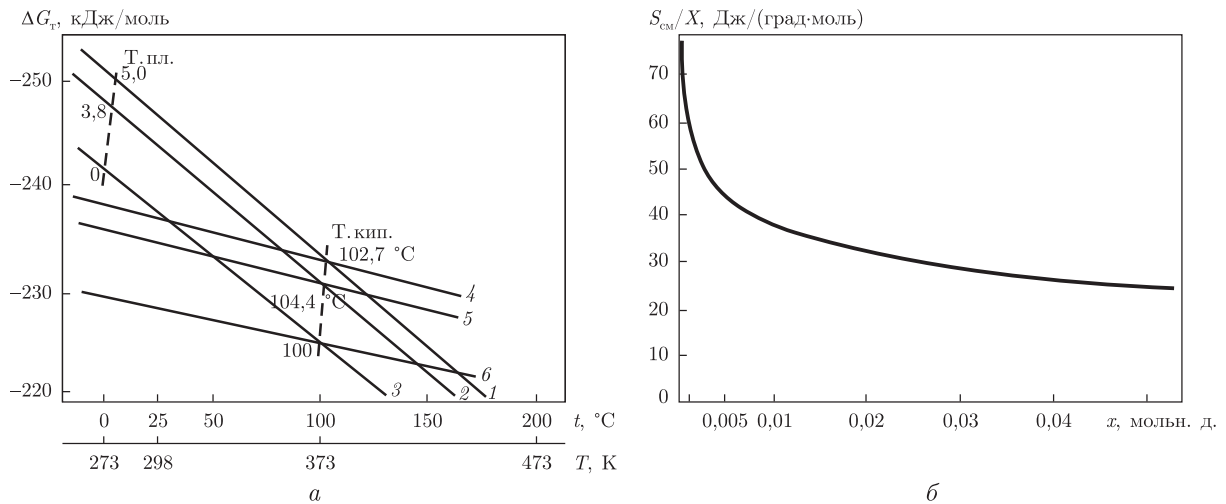


Рис. 1. Термодинамические параметры воды (свободная энергия, энтропия):
 а — зависимость свободной энергии образования воды с разными изотопами от температуры [5]: 1 — T_2O ж, 2 — D_2O ж, 3 — H_2O ж, 4 — T_2O г, 5 — D_2O г, 6 — H_2O г;
 б — зависимость энтропии смешения ($S_{см}$) изотопного раствора от мольной доли компонента (X): чем X меньше, тем больший ее вклад в энтропию и тем устойчивее раствор по формуле (1) [6]

противя (H) и подчиненного дейтерия (D) (0,015% по массе и менее), а также преобладающего ^{16}O и подчиненного ^{18}O (0,2% по массе и менее). Этот раствор имеет позитивную энтропию смешения — около 0,02 Дж/(град·моль) (рис. 1) и, естественно, более устойчив, нежели каждый изотопный компонент воды отдельно. В то же время между тяжелыми изотопами — D и ^{18}O в метеорной воде существует устойчивая корреляция [1], что нуждается в объяснении (рис. 2). Кроме того, рудоносный раствор гидротермальных месторождений, в том числе таких, как золотые и урановые, по изотопному составу близок к метеорным водам [1, 3, 4].

О методике физико-химического анализа изотопных систем. Термодинамический анализ веществ с изотопными растворами затруднен в связи с тем, что в современной изотопной геохимии используются не классические физико-химические термины, а некие новые физические параметры. В частности, как коэффициент фракционирования изотопа между двумя веществами (α), который равен константе обменной реакции изотопов и зависит от температуры. Однако при этом содержание изотопа определяется через величину δ , ‰, характеризующую отношение массы тяжелого изотопа к их сумме в образце и стандарте, по [2]. Это удобно для аналитики и при сравнении незначительного содержания тяжелого изотопа в веществе, но в физической химии и химической термодинамике используются другие параметры: мольная или атомная доля в химической формуле вещества, константа распределения, свободная энергия, энтальпия, энтропия реакции и другие параметры для оценки физико-химических условий геохимических процессов [5] (см. рис. 1–3).

Следует объяснить известную четкую положительную корреляцию содержания D и ^{18}O в метеорной воде (см. рис. 2). Для этого необходимо проанализировать некоторые термодинамические параметры разных изотопных молекул в изотопном растворе метеорной воды, такие как энтропия, вероятность и свободная энергия смешения в следующих возможных изотопных молекулах: H_2 ^{16}O , DH ^{16}O , H_2 ^{18}O , DH ^{18}O , D_2 ^{18}O .

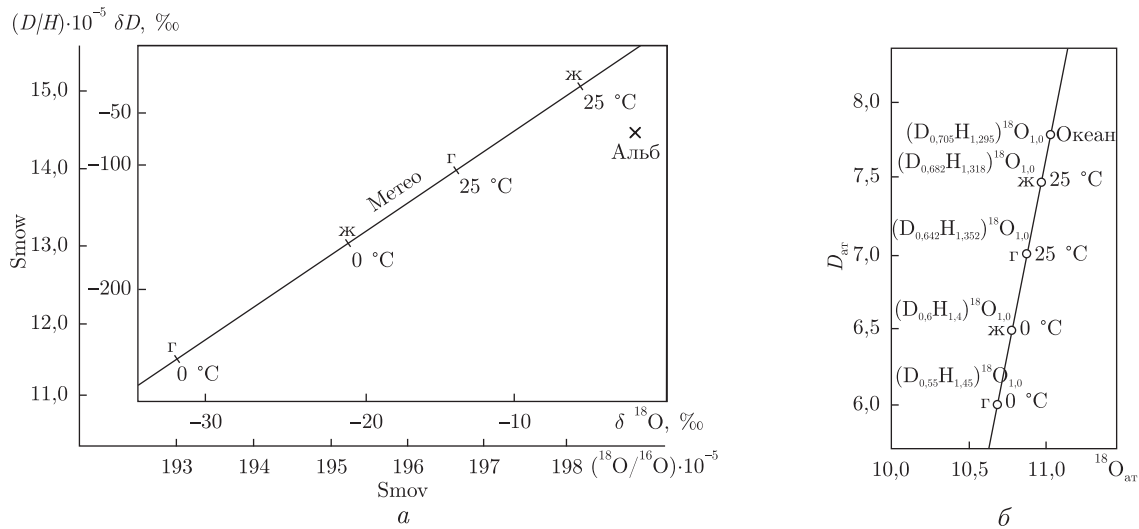


Рис. 2. Состав тяжелых изотопных растворов в метеорных водах:
 а — положительная линейная корреляция между содержанием (в массовой доле $X \cdot 10^{-5}$ и в виде δ) D и ^{18}O в метеорных водах [1, 2];
 б — атомные количества D и ^{18}O в метеорной воде и химические формулы молекул тяжелой воды (газа и жидкости) в метеорных водах при разных температурах: в океане (при критической температуре воды $374\text{ }^\circ\text{C}$), а также при 25 и $0\text{ }^\circ\text{C}$, рассчитаны на 1 ат ^{18}O .
 Крестиком обозначен состав воды во флюидных включениях в рудных альбититах месторождений урана докембрия Украинского щита [4]

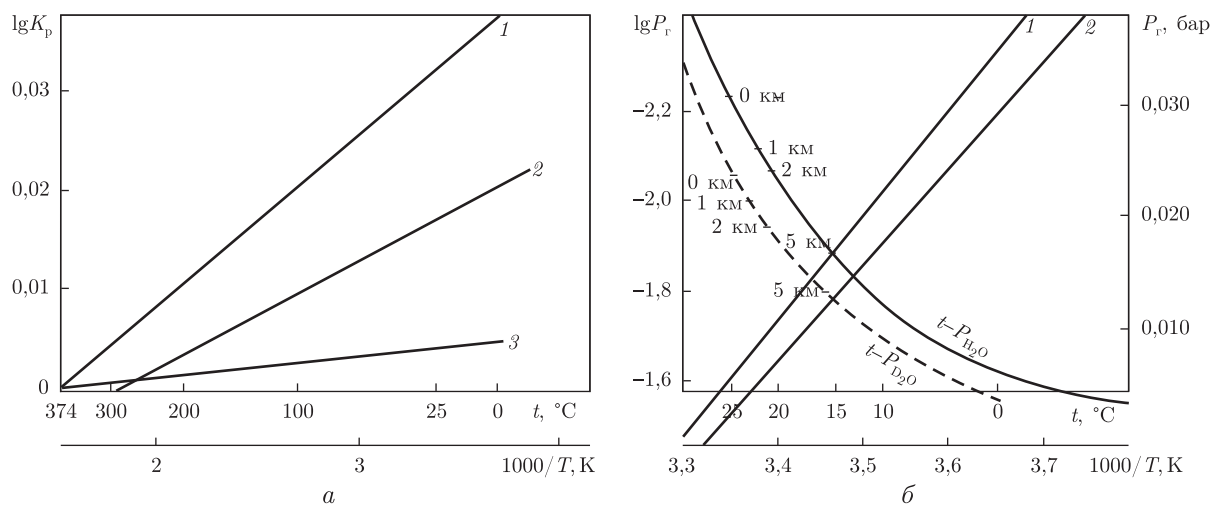


Рис. 3. Зависимость коэффициента распределения изотопов ($\lg K_p$) и $\lg K_p$ парциального давления водного пара (P_r) от температуры по различным реакциям:
 а — $\lg K_p$ D по реакции 1 — $\text{H}_2\text{O г} + \text{D}_2\text{O ж} = \text{H}_2\text{O ж} + \text{D}_2\text{O г}$ (1); $\lg K_p$ ^{18}O по реакции 2 в воде между $\text{H}_2\text{O ж}$ и $\text{H}_2\text{O г}$ (2) $\lg K_p$ ^{18}O по реакции 3 между водой и углекислым газом — $\text{H}_2\text{O ж} - \text{CO}_2$ (3) [2]. При увеличении температуры графики $\lg K_p$ сходятся у критической температуры воды, которая, видимо, отвечает температуре формирования воды океана.
 б — зависимость парциального давления протиевого водного пара (P_r) по реакции: $\text{H}_2\text{O ж} = \text{H}_2\text{O г}$ (1) и тяжелого дейтериевого водного пара ($P_{D_2O г}$) по реакции: $\text{D}_2\text{O ж} = \text{D}_2\text{O г}$ (2) от температуры, а также от температуры и атмосферного давления на разных высотах

Атомные содержания разных изотопов в метеорной жидкой воде при 25 °С следующие: H = 0,9999625, D = 0,000075, ¹⁶O = 0,99989, ¹⁸O = 0,00011. Энтропия смешения ($S_{см}$) изотопного раствора в общем водном растворе определяется, например, для первой молекулы H₂ ¹⁶O (см. б на рис. 1) [6, 7] таким образом:

$$S_{см} = -R(\ln X_1 \cdot X_1 + \ln X_2 \cdot X_2 + \ln X_3 \cdot X_3 + \dots), \quad (1)$$

где $S_{см} = -R(2 \cdot 0,9999625 \cdot \ln 0,9999625 + 0,99989 \cdot \ln 0,99989) = -R(0,000185)$ (табл. 1, № 1).

Энтропия смешения изотопного водного раствора D_{0,682}H_{1,318}¹⁸O_{1,0}:

$$\begin{aligned} S_7 &= -R(0,000075 \cdot \ln 0,000075 + 0,0000145 \cdot \ln 0,0000145 + 0,00011 \cdot \ln 0,00011) = \\ &= -R(0,000713 + 0,00128 + 0,001003) = -R(0,003) \end{aligned}$$

(см. № 7 в табл. 1).

По энтропии смешения можно оценить состав вероятных устойчивых изотопных молекул в метеорной воде, поскольку вероятность процесса связана с его энтропией положительной корреляцией, согласно соотношению Больцмана [6, 7]:

$$S = R \ln W, \quad (2)$$

где W — мультиплетность или вероятность молярной системы.

На основании приведенных данных по энтропии смешения изотопов в воде можно сделать вывод о том, что наиболее устойчивыми изотопными молекулами являются растворы с низкой концентрацией изотопов (см. № 5–7 в табл. 1). Этим также объясняется четкая положительная корреляция между содержанием D и ¹⁸O в метеорной воде. Следовательно, добавление в водный раствор малых изотопов водорода или кислорода, имеющих незначительную концентрацию, увеличивает его устойчивость. Это касается не только D, ¹⁸O, но также и ¹⁷O, и трития (Т). Указанные изотопы образуют устойчивые молекулы в водном растворе и Т (в количестве 10²–10⁴ Бк/дм³) будет входить не в молекулу НТО [8], а скорее всего в молекулу тяжелой воды (DHT)₂ ¹⁸O.

Содержание тяжелых изотопов в воде увеличивается в ряду: газ — жидкость — лед с ростом температуры и давления в реакциях окисления и ошелачивания, а уменьшается при биогеохимических процессах взаимодействии с водородом, метаном и в органических веществах (в живых организмах, торфе, угле, нефти, горючем газе).

Таблица 1. Оценка состава, энтропии смешения и вероятность устойчивости изотопных молекул в метеорной воде при нормальной температуре

| № п/п | Молекула | $S_{см}/R$ | $S_{см}$, Дж/(град·моль) | ΔG_{298} , Дж/моль | $S_{см}$, % | W , % |
|-------|---------------------------------------------------|------------|------------------------------|-------------------------------|--------------|---------|
| 1 | H ₂ ¹⁶ O | 0,000185 | 0,00154 | -0,46 | 2 | 0,1 |
| 2 | DH ¹⁶ O | 0,000860 | 0,00715 | -2,13 | 7 | 0,4 |
| 3 | H ₂ ¹⁸ O | 0,001100 | 0,00920 | -2,73 | 9 | 0,7 |
| 4 | D ₂ ¹⁶ O | 0,001500 | 0,01250 | -3,72 | 12 | 1,7 |
| 5 | D ₂ ¹⁸ O | 0,002500 | 0,02100 | -6,20 | 21 | 16 |
| 6 | DH ¹⁸ O | 0,002760 | 0,02300 | -6,84 | 23 | 30 |
| 7 | D _{0,7} H _{1,3} ¹⁸ O | 0,003000 | 0,02500 | -7,45 | 26 | 51 |
| Сумма | — | — | 0,09940 | -29,53 | 100 | 100 |

О метеорной воде во флюиде метасоматоза и рудообразования. Вода гидросферы имеет постмагматическое происхождение, поскольку выделялась в раннем архее при кристаллизации огромной массы континентальных архейских плагиогранитов [9–11]. В раннем докембрии основная часть воды этой новообразованной гидросферы составила на первом этапе поверхностные воды в виде газовой атмосферы, а затем сплошной океан глубиной около 2000 м, которые подвергались метеорной переработке [9, 10].

Породы земной коры в докембрии подвергались значительному гидротермально-метасоматическому преобразованию с привнесением H_2O , K, O_2 , H_2 , CO_2 , S, Cl и других подвижных компонентов флюида, имеющего сильно кислую реакцию [12]. Для такой переработки нужен очень большой объем гидротермального флюида, значительно превышающий объем метасоматитов, поскольку растворимость во флюиде подвижных рудно-силикатных компонентов не более первых весовых процентов [13]. Естественно предполагать активное участие в этих процессах поверхностных вод гидросферы. Пористость пород земной коры составляет около 1%, увеличивается в разломно-трещинных зонах до 3–5% [9, 11, 14], а объем подземных вод в земной коре равен не более 3–5% поверхностных вод. Масса постмагматического флюида в земной коре, а также интрузивных тел гранитоидов, габброидов или ультрабазитов невелика и со временем резко снижалась. В то же время оказалось, что изотопный состав рудоносного флюида близок к метеорным водам [1, 4]. Отсюда следует логичный вывод о том, что метасоматиты и руды в земной коре преимущественно образовывались при инфильтрации поверхностных океанических метеорных вод по проницаемым зонам разломов и трещиноватости.

В образующихся трещиноватых зонах происходят метасоматические преобразования вмещающих пород и изменение состава жидкого существенно водного рудного флюида с глубиной от кислого до щелочного. В верхних горизонтах метасоматоз выражается в кислотном выщелачивании рудных компонентов из вмещающих пород с образованием вторичных кварцитов, а затем при низкой кислотности и нейтральной обстановке выпадают рудные компоненты в кварцевых жилах и в околожилных метасоматитах, в том числе в карбонатных метасоматитах. На магматические и метасоматические породы накладываются неоднократные процессы регионального метаморфизма от зеленосланцевой до гранулитовой фаций. Процессы метасоматоза и рудообразования также были многофазными, связанными с неоднократным раскрытием проницаемых зон в земной коре.

Такая инфильтрационно-метеорная модель объясняет наличие огромной массы флюида, которая должна участвовать в процессах метасоматоза и рудообразования в земной коре.

Выводы. Для оценки физико-химических условий геохимических процессов в окружающей среде большую и новую информацию дает термодинамический анализ широко распространенных изотопных систем. Благодаря низкому содержанию тяжелых изотопов изотопные растворы являются идеальными и устойчивыми, поскольку имеют повышенную энтропию и свободную энергию смешения. Атомное распределение изотопов между равновесными веществами, том числе в воде, и химические формулы веществ с участием изотопов зависят от температуры, давления и могут широко использоваться для геотермобарометрии, поскольку константа равновесия обменной реакции зависит от температуры, а реакции с участием газов — от величины газового давления.

Вода в гидросфере, атмосфере и земной коре, в частности при многих геохимических процессах (рудообразовании, метаморфизме, биогеохимии, в гидросфере и в атмосфере),

имеет метеорное происхождение. Этим, например, объясняется четкая корреляция между D и ^{18}O в воде [1, 3, 4].

Определена зависимость термодинамических параметров (свободная энергия, энтропия, константа распределения) обменных реакций: D и ^{18}O в воде между жидкой водой и паром ($\text{H}_2\text{O ж} - \text{H}_2\text{O г}$), между водой и углекислым газом ($\text{H}_2\text{O ж} - \text{CO}_2 \text{ г}$) от температуры. Приведены химические формулы тяжелой воды в метеорных водах при разных температурах. Показана зависимость энтропии смешения изотопного раствора от мольной доли компонента (X): чем X меньше, тем больший ее вклад в энтропию и тем устойчивее раствор.

Содержание дейтерия в воде увеличивается в ряду: газ — жидкость — лед с ростом температуры и давления в реакциях окисления и ошелачивания, а уменьшается при биогеохимических процессах, в реакциях с водородом, метаном и в органических веществах (в живых организмах, торфе, угле, нефти и горючем газе).

1. *Тейлор Х. П.* Применение изотопии кислорода и водорода к проблеме гидротермального изменения вмещающих пород и рудообразования // Стабильные изотопы и проблемы рудообразования. — Москва: Мир, 1977. — С. 213–295.
2. *Соботович Э. В.* Справочник по изотопной геохимии. — Москва: Энергоиздат, 1982. — 240 с.
3. *Белевцев Я. Н., Коваль В. Б., Бакаржиев А. Х. и др.* Генетические типы и закономерности размещения урановых месторождений Украины. — Киев: Наук. думка, 1995. — 396 с.
4. *Фомин Ю. А.* Изотопный состав компонентов флюидных включений в месторождениях золота и урана докембрия Украинского щита // Зб. наук. праць Ін-ту геохім. надзвичайн. ситуацій НАН України. — 2012. — Вип. 20. — С. 11–29.
5. *Термодинамические свойства индивидуальных веществ.* Т. 2, кн. 2 / Отв. ред. В. П. Глушко. — Москва: Наука, 1978. — 327 с.
6. *Поллинг Л.* Общая химия. — Москва: Мир, 1974. — 846 с.
7. *Белевцев Р. Я., Бойченко С. Г., Спивак С. Д. и др.* Термодинамика газового обмена в окружающей среде. — Киев: Наук. думка, 2007. — 247 с.
8. *Комов И. Л., Шраменко И. Ф., Диденко П. И., Долин В. В. и др.* Методическое пособие по обращению с тритиевыми отходами. — Киев: Ин-т геохим. окружающей среды НАН Украины, 2001. — 118 с.
9. *Белевцев Р. Я., Бухарев С. В., Коломиец Г. Д.* Концепция плутонического формирования континентальной земной коры Украинского щита // Минерал. журн. — 2000. — **22**. — № 2/3. — С. 118–131.
10. *Белевцев Р. Я.* Происхождение и эволюция внешних геосфер: газовой атмосферы, кислого океана, свободного атмосферного кислорода и возникновение жизни // Доп. НАН України. — 2011. — № 12. — С. 83–90.
11. *Курлов Н. С., Белевцев Р. Я., Решетняк В. В., Мечников Ю. П.* Криворожская сверхглубокая скважина: значение для петрогенезиса и геоэкологии // Минерал. журн. — 1997. — **19**, № 5. — С. 85–100.
12. *Белевцев Р. Я., Шестопалов В. М., Спивак С. Д. и др.* Геохимия литогенеза овручских кварцито-песчаников рифея // Пошук. та екол. геохімія. — 2010. — № 1(10). — С. 22–41.
13. *Кларк С. П.* Растворимость // Справочник физических констант горных пород. — Москва: Мир, 1969. — С. 385–404.
14. *Ронов А. Б., Ярошевский А. А., Мигдасов А. А.* Химическое строение земной коры и геохимический баланс главных элементов. — Москва: Наука, 1990. — 182 с.

Член-кореспондент НАН України Р. Я. Белєвцев

Про термодинамічний аналіз ізотопного обміну у воді гідросфери та земної кори

Для оцінки фізико-хімічних умов геохімічних процесів у гідросфері та земній корі запропоновано термодинамічний аналіз ізотопного обміну у воді, завдяки якому по константі розподілу ізотопних розчинів, вільної енергії та ентропії можна визначати температуру й тиск при метеорних і гідротермальних процесах. За ентропією змішування ізотопних розчинів розраховано склад стійких молекул важкої води та пояснено позитивну кореляцію між вмістом дейтерію (D) і ^{18}O у метеорній воді. Підземні води та гідротермальний рудоносний флюїд також мають метеорне походження. Вміст D у воді зростає в ряду: газ – рідина – лід при підвищенні температури й тиску в реакціях окиснення, карбонатації та вилуговування, а зменшується в кислих розчинах при біогеохімічних процесах, взаємодії з воднем, метаном та органічними речовинами (в живих організмах, торфі, вугіллі, нафті та в горючому газі).

Corresponding Member of the NAS of Ukraine **R. Ya. Belevtsev**

About thermodynamic analysis of the isotope exchange in water of the hydrosphere and the Earth crust

For a new estimate of the physico-chemical conditions of geochemical processes in the hydrosphere and the Earth crust, the thermodynamic analysis of the isotope exchange in water is proposed. By the constant of distribution of isotopes, free energy, and entropy, the thermodynamic analysis of isotope solutions allows us to determine the temperature and the pressure of meteoric and hydrothermal processes. By the mixing entropy of isotope solutions, the composition of stable molecules of D_2O is determined, and the positive correlation between contents of isotopes ^2H and ^{18}O in meteoric water is explained. Underground water and hydrothermal fluid have also the meteoric genesis. Contents of D in water increase in the row gas–liquid–ice with increase in the temperature and pressure in the reactions of oxidation, carbonation, and alkalination, but contents of D in water decrease by biogeochemical processes, by reactions with hydrogen, CH_4 , and organic substances (in living organisms, peat, coal, fuel gas).

Ю. І. Дубовенко

Про визначення початкового наближення для контактної задачі

(Представлено академіком НАН України В. І. Старостенком)

Запропоновано аналітичні моделі гравітаційного поля і горизонтально-шаруватого геологічного середовища. Перша модель отримана з плоского нормального потенціалу сили тяжіння в локальній точці. Інша модель — клас Чорного контактних поверхонь — отримана з відомого класу Страхова. Подано нові числові алгоритми для визначення початкового наближення густинного контакту та його асимптот у цьому класі.

Сучасні методи обробки геофізичних даних потребують створення *цифрових аналітичних моделей* поля і геологічного середовища, які націлені на застосування в ПС. Для цього слід виробити відповідні аналітичні конструкції. Одну з них — модель середовища типу контакту пропонуємо до розгляду.

Визначення контакту у відомих моделях середовища Страхова, Нумерова, Маловичка [1] означає обчислення *різниці ундуляцій* теоретичної моделі середовища та деякого опорного її елемента, від якого ці ундуляції не дуже ухиляються. Але при цьому слід заздалегідь знати елементи геометрії (глибину, форму, орієнтацію) опорного елемента (моделі тіла) як початкового наближення ітерацій. Для горизонтально-шаруватого середовища виведено *аналітичні моделі* поля і геологічного середовища, в яких ці опорні елементи розраховують у процесі ітерацій.

Аналітична модель поля і середовища. Розглядаємо горизонтально-шаруватий простір $E^{(3)}$ з двома густинними межами ∂G_1 й ∂G_2 розділу шарів G_1 й G_2 , відстань між якими $\text{dist}(\partial G_1, \partial G_2) \geq 0$ при $2G_1 \cap G_2 = G_2$. В області $G_2\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ — точки області $G^- = G_1 \cup \overline{G_2}$, $\overline{G_2} = G_2 \cup \partial G_2$, $x = (x_1, x_2, x_3)$ — точки замкнутої необмеженої області $\overline{G^+} = E^{(3)} \setminus G$, $\partial G^+ = \partial G_1$, а відстань між ними дорівнює $\gamma(x, \xi) = \left(\sum_{i=1}^3 (x_i - \xi_i)^2 \right)^{1/2}$.

Якщо область $\overline{G_2}$ заповнена масами з густиною $\delta_2(\xi)$, а область $G_0 = G_1 \setminus \overline{G_2}$ — з густиною $\delta_1(\xi)$ (рис. 1), де $\overline{n}(x)$ — одинична нормаль до поверхні ∂G^+ , зовнішньої щодо G^- , то нормальна сила тяжіння дорівнює

$$u(x) \equiv \frac{\partial V(x)}{\partial \overline{n}(x)} = f \int_{G^-} \delta(\xi) \frac{\partial}{\partial \overline{n}(x)} \frac{1}{\gamma(x, \xi)} d\xi, \quad (1)$$

де $\delta(\xi) = \delta_2(\xi) - \delta_1(\xi)$, $\xi \in \overline{G_2}$; $\delta(\xi) = 0$, $\xi \in \overline{G_0}$; f — гравітаційна стала.

Силу тяжіння описує функція

$$u(x) = |\text{grad } V(x)| = f \int_{G^-} \delta(\xi) |\text{grad}_x \gamma^{-1}(x, \xi)| d\xi, \quad (2)$$

оскільки значення сили тяжіння — це значення модуля градієнта потенціалу [2], а не її складові, в тому числі й (1). Але для малої області Ω можна використати вираз (1).

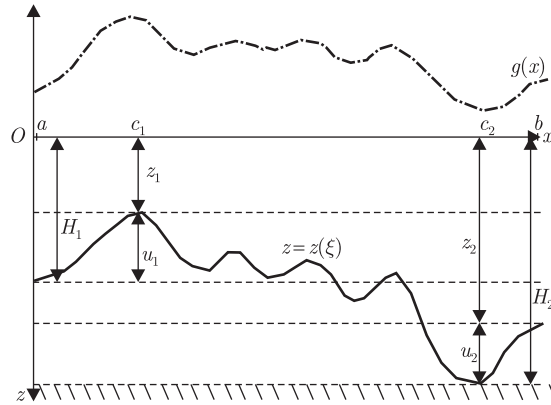


Рис. 1. Модель контактної середовища в класі Чорного

У цій області Ω , з відомою мірою наближення [3] ділянку $\partial G = \Omega \cap \partial G^+$ межі ∂G^+ вважаємо “необмеженою” площиною: $\partial G = \{x: x_3 = x_3(x_1, x_2) = \text{const}, (x_1, x_2) \in S_0\}$, де $S_0 = \Omega \cap \partial G^+$. Нехай в околі Ω^- функції $\delta_1(\xi) = \text{const}$, $\xi \in \overline{G}_2 \subset \Omega^-$, $\delta_2(\xi) = \text{const}$, $\xi \in \Omega^- \cap G_1$, і $\delta = \delta_2 - \delta_1$, а \overline{G}_2 — власна підмножина Ω^- . Межу Ω обираємо достатньо гладкою, для якої $\partial G_2 = \{x: x_i = x_i(x_j, x_k), (x_j, x_k) \in \partial S_i, i, j, k = 1, 2, 3; \bigcup \partial S_i = \partial G_2; x_i \in C^{(1,\alpha)}(\partial S_i)\}$.

За таких умов стосовно середовища викладених вище, отримуємо потенціал тяжіння:

$$u(x_{1,2,3}) \equiv \frac{\partial V(x_{1,2,3})}{\partial x_3} = f\sigma \int_{\Omega^-} \frac{\partial}{\partial x_3} \frac{d\xi_1 d\xi_2 d\xi_3}{\gamma^2(x, \xi)}. \quad (3)$$

Нерідко маси, що зосереджені в Ω^- , генерують аномалії $u(x_i)$, які витягнуті, скажімо, уздовж осі Ox_2 . Їх доцільно вимірювати по профілях, паралельних $O\xi_1$. Формула (3) непридатна для обробки таких вимірів. Але, інтегруючи вираз (3) за ξ_2 при умові, що $x_3 = 0$, $\xi_3 = \xi_3(\xi_1)$, $a \leq \xi_1 \leq b$, отримуємо аналітичну модель поля:

$$u(x, 0) = f\sigma \int_a^b d\xi_1 \int_{\xi_3^{(1)}}^{\xi_3^{(2)}} \frac{2\xi_3}{(\xi_1 - x_1)^2 + \xi_3^{(2)}} d\xi_3 = f\sigma \int_a^b \ln \frac{(\xi_1 - x_1)^2 + \xi_3^{(2)}(\xi_1)}{(\xi_1 - x_1)^2 + \xi_3^{(1)}(\xi_1)} d\xi_1, \quad (4)$$

де $\xi_3^{(1)} = \xi_3^{(1)}(\xi_1)$ і $\xi_3^{(2)} = \xi_3^{(2)}(\xi_1)$, $a \leq \xi_1 \leq b$ — криві, що обмежують знизу і згори тяжіючу плоску область S .

Аналітична модель середовища є підкласом одного з класів контактних поверхонь, для яких гарантовано єдиність розв’язку обернених задач гравіметрії [4–6].

У класі Остромигільського $\text{Ost}^{(1,\alpha)}(a, b)$ однозначно визначають змінну густину $\delta(\xi_1, \xi_3)$ і контакт $x_3(\xi_1)$ за значеннями зовнішнього поля [4] для заданого контакту:

$$x_3(\xi_1) = \begin{cases} -h + \delta x_3(\xi_1), & \xi \in [a, b], \\ -h, & \xi_1 \notin [a, b], \end{cases} \quad (5)$$

де $\delta x_3(a) = \delta x_3(b) = 0$, $x_3(\xi_1)$ — кусково-неперервна функція;

$$\begin{aligned} |\delta x_3(x_1)| &\geq c(x_1 - a)^{1+\alpha}, & a \leq x_1 \leq a + \delta, & \alpha > 0, \\ |\delta x_3(x_1)| &\geq c(b - x_1)^{1+\alpha}, & b - \delta \leq x_1 \leq b, & \alpha > 0. \end{aligned} \quad (6)$$

З підкласів $\text{Ost}_{(+)}^{(1,\alpha)}$ й $\text{Ost}_{(-)}^{(1,\alpha)}$ легко утворити моделі антикліналей і синкліналей.

У класі Страхова $\text{St}^{(1,\alpha)}(a, b)$ [5] контакт задається рівнянням

$$x_3(\xi_1) = \begin{cases} -h_1 + \delta x_3(\xi_1), & \xi_1 \in [a, b), \\ -h_2, & \xi_1 = b, \end{cases} \quad (7)$$

де $\delta x_3(a) = 0$, $h_1, h_2 > 0$, $x_3(\xi_1) \leq 0$ — кусково-неперервна функція, задовольняє на кінцях інтервалу умовам

$$\begin{aligned} |\delta x_3(\xi_1)| &\geq a_1(\xi_1 - a)^{1+\alpha}, & a \leq \xi_1 \leq a + \delta, & \alpha > 0, \\ |\delta x_3(\xi_1)| &\geq b_1(b - \xi_1)^{1+\alpha}, & b - \delta \leq \xi_1 \leq b, & \delta > 0, \end{aligned} \quad (8)$$

набуваючи на $[a, b]$ скінченне число екстремумів. Контакт можна обмежити так:

$$z_S = z(c_1) = \sup_{[a,b]} \text{extr } z(\xi_1), \quad -z_S \leq h_1, \quad z_i = z(c_2) = \inf_{[a,b]} \text{extr } z(\xi_1), \quad -z_i \leq h_2, \quad (9)$$

де $c_1, c_2 \in [a, b]$, а точки c_1, c_2 — внутрішні точки відрізка $[a, b]$, або збігаються з його межами. У останньому випадку за умови $h_1 < h_2$ маємо $c_1 = a$, $c_2 = b$.

Якщо $a = -\infty$, $b = +\infty$, вирази (7), (8) набувають вигляду

$$\begin{aligned} z &= z(\xi) = -h_1 + \delta z(\xi), & \xi \in (-\xi_0, \xi_0), \\ |z(\xi) - h_1| &\leq a_2 |\xi|^{-\beta}, & |\xi| \geq \xi_0, \\ |z(\xi) - h_2| &\leq b_2 |\xi|^{-\beta}, & \beta > 0, \end{aligned} \quad (10)$$

де $h_1, h_2 > 0$, а $z_S = z(c_0) = \sup_{[-\xi_0, \xi_0]} \text{extr } z(\xi_1)$, $z_i = z(c_2) = \inf_{[-\xi_0, \xi_0]} \text{extr } z(\xi_1)$ при $c_1, c_2 \in [-\xi_0, \xi_0]$, і (для певності) нехай $-z_S \leq h_1$, $-z_i \leq h_2$, $0 < h_1 < h_2$. Для такого контакту шарів сталої густини встановлена єдиність [5].

Нехай G^- — горизонтальна смуга, що обмежена згори і знизу прямими $z_1 = h_1$, $z = h_2$, $0 < h_1 < h_2 < +\infty$, розділена на два шари зі щільністю δ_1 й δ_2 нескінченно гладкою кривою ∂G^- , з асимптотою $z = h$, $h_1 < h < h_2$, зірчастою щодо нескінченно віддаленої точки, де

$$|z(\xi) - h| \leq k |\xi|^\alpha, \quad \alpha > 0, \quad |\xi| > \xi_0, \quad z(\xi) \in \partial G. \quad (11)$$

Якщо значення h і стрибок густини $\Delta\delta = \delta_2 - \delta_1$ відомі, то контакт ∂G шарів за зовнішнім полем відновлюється *однозначно* і є функцією класу (11), який, в свою чергу, є підкласом класу (10). Назвемо клас (11) $\text{Ch}^{(1,\beta)}(-\infty, \infty)$ класом Чорного (вітчизняного науковця-геофізика А.В. Чорного, який заклав основи дослідження функціоналів для контактних поверхонь). Клас (10) названо класом Страхова $\text{St}^{(1,\beta)}(-\infty, \infty)$. Очевидно, що правдиві відношення:

$$\text{Ost}^{(1,\alpha)}(a, b) \subset \text{St}^{(1,\alpha)}(a, b), \quad \text{Ch}^{(1,\beta)}(-\infty, \infty) \subset \text{St}^{(1,\beta)}(-\infty, \infty) \supset \text{St}^{(1,\alpha)}(a, b). \quad (12)$$

Ця модель відображає складний розподіл мас — n рудних тіл або контактів, які парно не перетинаються (див. рис. 1). Головною проблемою є єдиність розв'язку задачі (4) в класі (11). Ця єдиність гарантована у вузьких підкласах класів (12). Їх можна окреслити за наявності потужної апріорної інформації про середовище (11). У разі її відсутності лишається сподіватися на відомі наслідки з теорем розділення полів, які є справедливими і для моделі (11).

Алгоритми обчислення контакту. Щоб розв'язати нелінійне інтегральне рівняння (4), задавши сталі асимптоти, які належать одній з множин (12) допустимих функцій, після ряду перетворень отримаємо таке рівняння:

$$u(x) = k \int_a^b \ln \frac{(\xi_1 - x_1)^2 + H^2}{(\xi_1 - x_1)^2 + x_3^2(\xi_1)} d\xi_1. \quad (13)$$

Розглядаючи його як функціонал $g(x, z)$ від шуканої функції $x_3(\xi_1)$ у лінійному просторі, знайдемо приріст $\Delta g(x, z) = g(x, z + h) - g(x, z)$, де $h(a) = h(b) = 0$:

$$\begin{aligned} \Delta g(x, z) = & - \int_a^b \frac{2z(\xi)}{(\xi - x)^2 + z^2(\xi)} h(\xi) d\xi - \int_a^b \left\{ \frac{[(\xi - x)^2 - z^2(\xi)]}{[(\xi - x)^2 + z^2(\xi)]^2} + \right. \\ & \left. + \frac{2}{3} \left[- \frac{3\delta z(\xi)}{\{(\xi - x)^2 + \delta z^2(\xi)\}^2} + \frac{4\delta z(\xi)}{\{(\xi - x)^2 + \delta z^2(\xi)\}^3} \right] h(\xi) \right\} h^2(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (14)$$

та $\delta z(\xi) = z(\xi) + \theta(\xi)h(\xi)$. Після ряду аналітичних перетворень на його основі отримуємо кілька способів відновлення контакту $x_3(\xi_1)$, $a \leq \xi \leq b$ за заданим полем $g(x)$, $c \leq x \leq d$, $[a, b] \subset [c, d]$ за умови $\text{mes}[a, b] < \text{mes}[c, d]$.

Зокрема, при заданих a, b, H знаходимо $\Delta z(\xi) = z_{n+1}(\xi) - z_n(\xi)$, де

$$\begin{aligned} & \int_a^b \frac{2z_n(\xi)}{(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)} z_{n+1}(\xi) d\xi = \\ & = \int_a^b \ln \frac{(\xi - x)^2 + H^2}{(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)} d\xi - g(x) + \int_a^b \frac{2z_n(\xi)}{(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)} \Delta z_n(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (15)$$

При $z_{n+1}(\xi) = z_n(\xi) + h_n(\xi)$, $n = 0, 1, 2, \dots$, $h_0(\xi) = 0$, та відомому значенні $z_0(\xi) : z_1(\xi) = z_0(\xi) + h_0(\xi)$ маємо:

$$- \int_a^b \frac{2z_n(\xi)}{(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)} h_{n+1}(\xi) d\xi = \int_a^b \ln \frac{(\xi - x)^2 + H^2}{(\xi - x)^2 + z_{n+1}^2(\xi)} d\xi - g(x), \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & - \int_a^b \frac{2z_n(\xi)}{(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)} h_{n+1}(\xi) d\xi = \\ & = \int_a^b \ln \frac{(\xi - x)^2 + H^2}{(\xi - x)^2 + z_{n+1}^2(\xi)} d\xi - g(x) + \int_a^b \frac{(\xi - x)^2 - z_n^2(\xi)}{[(\xi - x)^2 + z_n^2(\xi)]^2} h_n^2(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (17)$$

Подібним чином, крім контакту $z = z(\xi)$, $a \leq \xi \leq b$, знайдемо “асимптоту” $H = \text{const}$: наприклад, задаючи H_0 і $z_0(\xi)$, вважаючи, що $z_{n+1}(\xi) = z_n(\xi) + \Delta z_n(\xi)$, $H_{n+1} = H_n + \Delta H_n$, $n = 0, 1, 2, \dots$, і $\Delta z_0(\xi) \equiv 0$, $\Delta H_0 \equiv 0$, $a \leq \xi \leq b$, отримуємо аналог виразу (15):

$$\int_a^b \frac{2z_n(\xi)}{(\xi-x)^2 + z_n^2(\xi)} \Delta z_n(\xi) d\xi - \int_a^b \frac{2H_n}{(\xi-x)^2 + H_n^2} \Delta H_n d\xi =$$

$$= \int_a^b \ln \frac{(\xi-x)^2 + H_n^2}{(\xi-x)^2 + z_n^2(\xi)} d\xi - g(x). \quad (18)$$

Існують відповідні аналоги для виразів (16) й (17), що отримані за додаткової умови

$$z_{n+1}(\xi) = z_n(\xi) + h_n(\xi), \quad H_{n+1} = H_n + \tau_n, \quad (19)$$

$$h_0(\xi) \equiv 0, \quad \tau_0 \equiv 0, \quad H_1 = H_0, \quad z_1 = z_0(\xi).$$

Вибір початкових наближень. У виразах (15)–(18) істотною є проблема вибору початкового наближення контакту. Розв’яжемо її таким чином.

Нехай крива $g(x)$, $c \leq x \leq d$ має на $[c, d]$ кілька екстремумів у точках $c_i \in [c, d]$, $i = 1, 2, \dots, n$. Оскільки $\delta > 0$, то кожному екстремуму відповідає однойменний екстремум $z = z(\xi)$, $a \leq \xi \leq b$. Визначимо у множині $\{\text{extr}_{[c,d]} g(x)\}$ найбільший максимум $z_S \equiv g(c_i) = \sup_{[c,d]} \{\text{extr}_{[c,d]} g(x)\}$ і найменший мінімум $z_i \equiv g(c_j) = \inf_{[c,d]} \{\text{extr}_{[c,d]} g(x)\}$. Нехай $z_S \equiv z(c_i) = \sup_{[c,d]} \{z(\xi)\}$, $z_i \equiv z(c_j) = \inf_{[c,d]} \{z(\xi)\}$ – відповідні екстремуми z (тут абсциси g_S й z_S (g_i й z_i) збігаються, що не в усіх випадках вірно).

Початкове наближення контакту задаємо двома способами:

$$z_0 = z_0(\xi) = -H_0 + \Delta g(\xi, H_0), \quad a \leq \xi \leq b, \quad (20)$$

$$z_0 = z_0(\xi) = -H_0 + k_0 \Delta g(\xi), \quad a \leq \xi \leq b, \quad (21)$$

де $H_0 > 0$ – задана стала “асимптота” z_0 на лівому кінці $[a, b]$, $\Delta g(\xi) = g(\xi) - g(a)$, $\Delta g(\xi, H_0)$ – аналітично продовжене значення $\Delta g(\xi)$ на рівні $-H_0$, $k_0 = k(H_0)$ – невідомий коефіцієнт.

Знайдемо k_0 . Нехай у точці $c \in [a, b]$ розташована z_S (z_i). Отримаємо такі нерівності для визначення початкових z_S й z_i при заданих H , g_S й g_i :

$$g_S \geq (1 - c_i) \ln \frac{(1 - c_i)^2 + H^2}{(1 - c_i)^2 + z_S^2} + c_i \ln \frac{c_i^2 + H^2}{c_i^2 + z_S^2} + 2H \arctg \frac{H}{H^2 - c_i(1 - c_i)} -$$

$$- 2z_S \arctg \frac{z_S}{z_S^2 - c_i(1 - c_i)}, \quad (22)$$

$$g_i \leq (1 - c_j) \ln \frac{(1 - c_j)^2 + H^2}{(1 - c_j)^2 + z_i^2} + c_j \ln \frac{c_j^2 + H^2}{c_j^2 + z_i^2} + 2H \arctg \frac{H}{H^2 - c_j(1 - c_j)} -$$

$$- 2z_i \arctg \frac{z_i}{z_i^2 - c_j(1 - c_j)}. \quad (23)$$

Відшукування значень z_S й z_i однотипне, тому індекси опущено. Утворимо функцію

$$f(z) = (1-c) \ln[(1-c)^2 + z^2] + c \ln(c^2 + z^2) + 2z \operatorname{arctg} \frac{z}{z^2 - c(1-c)} - \\ - (1-c) \ln[(1-c)^2 + H^2] - c \ln(c^2 + H^2) - 2H \operatorname{arctg} \frac{H}{H^2 - c(1-c)} + g. \quad (24)$$

Наближення z_n якогось із значень z_S й z_i визначаємо за схемою Чебишева [7]:

$$z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)} - \frac{f''(z_n)f^2(z_n)}{2f'^3(z_n)}, \quad (25)$$

де $f(z)$ визначається з функції (24). Процес (25) при вдалому виборі z_n швидко збігається: 4 ітерації для отримання $z^{(0)}$ з точністю до 10^{-7} , що узгоджується з результатами праці [7].

Зауваження 1. З виразів (22), (23) випливає, що $f(z_S) \geq 0$, $f(z_i) \leq 0$, а за не дуже малих $H > 0$ маємо $f(z_S) > 0$, $f(z_i) < 0$. Тому корені z_B , z_H рівнянь $f(z_B, g_S) = 0$, $f(z_H, g_i) = 0$ дають наближення z_S й z_i знизу та зверху, що погіршує “якість” початкового наближення $z_0 = z_0(\xi)$.

Зауваження 2. Величини z_S (z_i) визначаються неякісно при великих H , тим паче, якщо вони є великими. Тому разом із z_S , z_i визначають при $\delta g = g(b) - g(a) \neq 0$, крім заданої лівої H^- і праву “асимптоту” H^+ кривої $z = z(\xi)$ за описаною вище схемою, тільки у виразі $f(z)$ замість g_S (g_i) беруть δg для визначення H^+ .

Обчисливши для кожного заданого значення H_i^- , $i = 1, 2, \dots, n$, лівої “асимптоти” шуканої кривої $z = z(\xi)$, $a \leq \xi \leq b$, значення параметрів $z_S^{(i)}$, $z_i^{(i)}$, H_i^+ , $i = 1, 2, \dots, n$, знайдемо

$$u^{(i)} = z_S^{(i)} - H_i^-, \quad u_{(i)} = z_i^{(i)} - H_i^-, \quad \Delta H_i = H_i^+ - H_i^-, \\ \delta g = g(b) - g(a), \quad \delta g_{\max} = g_S - g(a), \quad \delta g_{\min} = g_i - g(a), \quad (26)$$

звідки $k_0^{(i)} = \frac{1}{e} \sum_{i=1}^e k_i^{(i)}$, де $k_1^{(i)} = \frac{|u^{(i)}|}{|\delta g_{\max}|}$, $k_2^{(i)} = \frac{|u_{(i)}|}{|\delta g_{\min}|}$, $k_3 = \frac{|\Delta H|}{|\delta g|}$.

Виведено нові аналітичні конструкції для обчислення складних контактів (20), (21). Для їх обчислення запропоновано процес простих ітерацій (25), а для послідовного уточнення виконують процес (26).

Схему відшукування початкового наближення для контактів з класів “антикліналей” і “синкліналей” $\operatorname{Ost}_{(\pm)}^{(1,2)}(a, b)$ апробовано на функціях, які моделюють антикліналь і синкліналь: $z(\xi) = -H + a(1 - \xi)\xi$, $z(\xi) = -H - a(1 - \xi)\xi$, $0 \leq \xi \leq 1$. Ці конструкції краще збігаються при обчисленні за першим зі способів (15)–(17) порівняно з відомими [8]. Для асимптот H_i^- , H_i^+ характер збіжності ітерацій є аналогічним.

1. Чорний А. В., Дубовенко Ю. І. Дослідження оберненої задачі потенціалу для контактної поверхні // Геофиз. журн. – 2002. – **24**, № 3. – С. 77–92.
2. Дубовенко Ю. І. Задача Алексідзе для відновлення потенціалу сили тяжіння // Там само. – 2009. – **31**, № 6. – С. 132–139.
3. Дубовенко Ю. І. Об определении погрешностей гравиметрических трансформаций // Геофиз. журн. – 2011. – **33**, № 1. – С. 136–146.
4. Остромигильский А. Х. О единственности решения обратной задачи теории потенциала // Журн. вычисл. мат. и мат. физики. – 1970. – **10**, № 2. – С. 352–361.

5. Страхов В. Н. К теории обратной задачи логарифмического потенциала для контактной поверхности // Изв. АН СССР. Сер. Физика Земли. – 1974. – № 6. – С. 39–60.
6. Чердиченко В. Г. К вопросу об определении плотности тела по заданному потенциалу // Докл. АН СССР. – 1978. – 240, № 5. – С. 1032–1035.
7. Березин И. С., Жидков Н. П. Методы вычислений. Т. 2. – Москва: Физматгиз, 1960. – С. 140–143.
8. Гравиразведка: Справочник геофизика. – Москва: Недра, 1990. – 607 с.

Институт геофізики ім. С. І. Субботіна
НАН України, Київ

Надійшло до редакції 12.03.2013

Ю. И. Дубовенко

Об определении начального приближения для контактной задачи

Предложены аналитические модели гравитационного поля и горизонтально-слоистой геологической среды. Первая модель получена из плоского нормального потенциала силы тяжести в локальной точке. Другая модель — класс Черного контактных поверхностей — получена из известного класса Страхова. Даны новые численные алгоритмы для определения начального приближения плотностного контакта и его асимптот в этом классе.

Yu. I. Dubovenko

On the initial approximation definition for a contact problem

Analytical models for the gravity field and the horizontally layered geological medium are offered. The first model is derived from the 2-D normal gravity potential at a local point. The last model — a Chorny contact surfaces class — is derived from the known Strakhov class. New numerical algorithms for the definition of the start approximation of a density interface and its asymptotes in that class are given.

Б. Н. Іванов, І. І. Михальченко, В. О. Синицин, В. В. Загородній

Речовинне перетворення дайок діабазу в ореолі апогранітних лужних натрієвих метасоматитів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України О. М. Пономаренком)

Наведено дані щодо структурно-текстурного, мінерального та хімічного перетворень діабазів дайкового тіла, задокументованого у межах зонально побудованого ореола апогранітних лужних натрієвих метасоматитів (ЛНМ) і вихідних гранітів Новоукраїнського масиву (Інгульський мегаблок Українського щита). Зокрема, встановлено значне збільшення масової частки Na_2O у породі дайкового тіла, що розміщується послідовно серед гранітів і далі серед метасоматитів периферичної і центральної частин метасоматичного ореола. Отримані результати підтверджують висновок про те, що досліджені дайки вкорінилися в породі Новоукраїнського гранітоїдного масиву до утворення порід формації ЛНМ центральної частини Українського щита.

Прояви лужного натрієвого метасоматозу в породах кристалічного фундаменту центральної частини Українського щита (УЩ) відомі з 20-х років минулого століття. Детальні описи метасоматитів даного петрогенетичного типу по гранітоїдах, гнейсах, залізистих і діопсидових кварцитах, сланцях і доломітах наведені в багатьох публікаціях [1–5 та ін.]. З кінця 60-х років були задокументовані численні випадки альбітизації, егірнізації дайок діабазу в зонах Суботсько-Мошоринського, Кіровоградського, Софіївсько-Компанієвського розломів та тектонічних порушень Новоукраїнського масиву [1, 3, 6, 7]. Проте речовинний склад продуктів подібних метасоматичних перетворень діабазів детально не досліджувався. Нещодавно в роботах [3, 6, 7] вперше описано мінеральні асоціації приконтактової ділянки діабазової дайки, локалізованої в апогранітоїдних альбітитах актинолітової фації [5] лужних натрієвих метасоматитів (ЛНМ). У повідомленні [6] стисло представлено результати петрографічного і петрохімічного вивчення діабазів дайкового субгоризонтального тіла, що розміщується в межах ореола ЛНМ Апрельського родовища та поза його межами в оточуючих новоукраїнських гранітах. Авторами [3, 6, 7] було наведено вагомні аргументи, які вказують на доальбітитовий вік досліджених дайок.

Метою даної роботи є встановлення структурно-мінералогічних та хімічних характеристик діабазів єдиного дайкового тіла залежно від його положення відносно зонально побудованого ореола апогранітних ЛНМ Новоукраїнського масиву.

Об'єкт дослідження — суцільна діабазова дайка, що розміщується серед гранітів Новоукраїнського масиву та апогранітних порід, які належать до формації ЛНМ. У межах дослідженої ділянки, що знаходиться в зоні однієї з гілок Тарасівського розлому (північно-західна частина Новоукраїнського масиву), зонально побудований ореол апогранітних метасоматитів формує потужне тіло, що витягнуте в субширотному напрямі та падає на південь (рис. 1). Як видно на рисунку, досліджувана субгоризонтальна дайка перетинає тіло, складене метасоматичними породами, та виходить за межі північної та південної границі цього тіла в граніти новоукраїнського комплексу (PR_1^1).

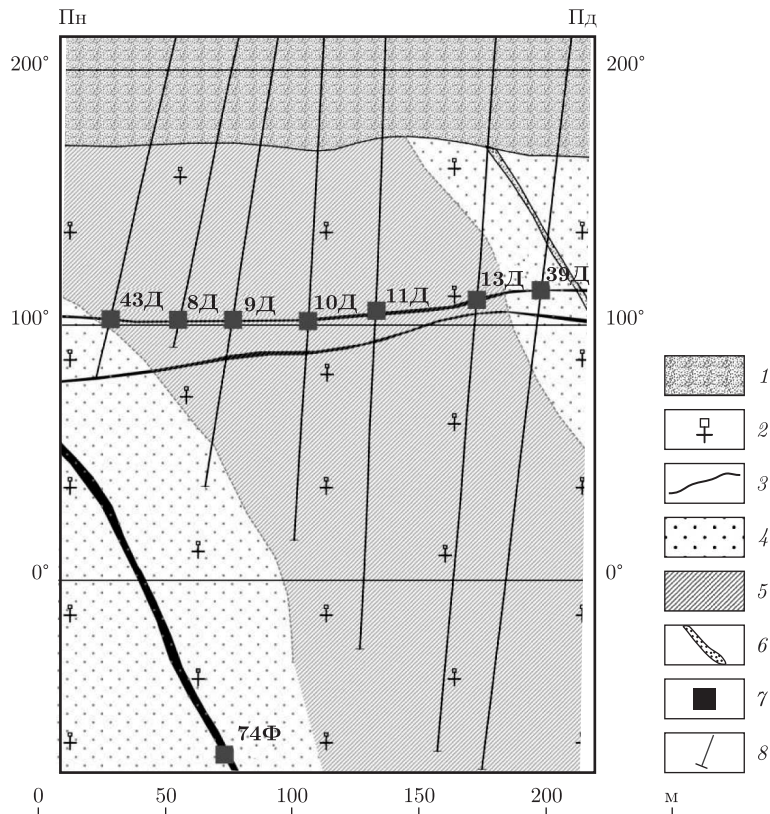


Рис. 1. Схематичний геологічний розріз за даними КП «Кіровгеологія».

Умовні позначення: 1 — пухкі поклади; 2 — граніти новоукраїнського комплексу; 3 — дайки діабазу; новоутворення, що віднесені до формації ЛНМ зон глибинних розломів; 4 — діафорити; 5 — ЛНМ; 6 — розлом; 7 — місця відбору проб і шліфів; 8 — стовбури свердловин

Методи дослідження. Було виконане вивчення керну свердловин, пройдених у породах кристалічного фундаменту північно-західної частини Новоукраїнського масиву при проведенні геологорозвідувальних робіт КП «Кіровгеологія». Дослідження включали документацію та опробування кам'яного матеріалу, петрографічне вивчення шліфів і визначення хімічного складу дайкових порід методом рентгенофлуоресцентного аналізу [8] (науково-дослідна лабораторія мінералого-геохімічних досліджень геологічного факультету Київського національного університету ім. Тараса Шевченка). Схему відбору проб для проведення хімічного аналізу показано на рис. 1. Узагальнення результатів проведених досліджень наведено нижче.

Зональність метасоматичного ореола виражена в тому, що центральна його частина складена альбітитами діопсидовими, гранат-діопсидовими, гранат-актинолітовими й епідот-актинолітовими. В цілому вказані мінеральні типи альбітитів змінюють один одного в напрямі від внутрішніх до крайових ділянок метасоматичного тіла. Периферична частина ореола складена мікроклін-альбітовими (альбіт-мікрокліновими) метасоматитами, в яких темнозбарвлені мінерали представлені епідотом і амфіболами актиноліт-рибекітового ряду, іноді біотитом або хлоритом. Граніти, що межують з метасоматичними породами перетворені у так звані діафорити [1, 3, 4] епідот-хлорит-кварц-мікроклін-альбітового складу, які на розрізі (див. рис. 1) показані поза межами метасоматичного тіла. Використо-

вуючи емпіричну схему [5], вказана будова ореола може бути інтерпретована як прояв неізотермічної зональності, яка представлена метасоматичними зонами: високотемпературної (гранат-діопсидової) фації в центральних частинах, середньотемпературних (актинолітової, лужноамфіболової) фацій в проміжних частинах та низькотемпературної (епідот-хлоритової) фації крайових частин ореола та діафторитів. Крім того, в межах внутрішніх зон розглянутого ореола локально проявлені накладені гематит(магнетит)-карбонат-флогопітові мінеральні асоціації постальбітитової стадії [4].

Дайкові тіла в межах дослідженої ділянки мають як субгоризонтальне, так і круте залягання (див. рис. 1), при цьому останні мають північно-західне простягання. В дайках спостерігаються зони загартування на контактах з вмісними гранітами та ксенолітами метаморфітів інгульської серії PR_1^1 . Спостерігається проникнення магматичного матеріалу в пори бічних порід, а контакти дайок січуть як сланцюватість ксенолітів кристалосланців, так і “трахітоїдність” новоукраїнських гранітів. В ендоконтактових ділянках дайок зустрічаються оплавлені уламки граніту, що відрізняє ці утворення від ксенолітів метаморфічних порід основного складу. В межах метасоматичного тіла темно-зелені дайки добре вирізняються на тлі зеленувато або червонувато-сірих апогранітних альбітитів. Візуально створюється враження, що вони “січні” щодо метасоматитів. Проте у випадках, коли зберігаються нормальні контакти між дайкою і оточуючою породою, за різницею в забарвленні встановлюється виразна зональна будова приконтактових частин дайок. Подібна смугаста текстура дайкової породи на контакті з актинолітовими альбітитами описана та інтерпретована нами як метасоматична колонка [7].

Структура та мінеральний склад дайкових порід істотно відрізняються залежно від мінерального типу оточуючих порід.

У дайці, що січе слабодіафторований граніт (див. пробу 74Ф на рис. 1), діабаз має темно-зелений колір, масивну текстуру, повнокристалічну дрібно-, середньозернисту структуру з розміром зерен 0,5–2,5 мм. Ідіоморфізм плагіоклазу відносно піроксену зумовлює гіпідіоморфнозернисту діабазову структуру. Порода складена лабрадором № 56 (65–70%) і клінопіроксеном (15–20%), а також біотитом (до 1%) та рудними мінералами (2–3%). Вторинні мінеральні утворення представлені тальк-магнетитовими псевдоморфозами по олівіну (5–7%) і актинолітом (1–2%).

У тій частині дайки, що розміщується серед інтенсивно діафторованих гранітів поблизу висячого боку метасоматичного тіла (див. пробу 39Д на рис. 1), вихідна типова діабазова структура спостерігається лише на окремих ділянках. Частіше основна маса породи є сплутано-волокнистою сумішшю плагіоклазу, сфену, ільменіту, титаномагнетиту, амфіболу, іноді біотитоподібної слюдки, хлориту та калієвого польового шпату.

У породах дайки, що локалізована серед лужних натрієвих метасоматитів (проби 8Д, 9Д, 10Д, 11Д, 13Д, 43Д), вихідна діабазова структура не зберігається. Плагіоклаз представлений чистим альбітом, крім того, іноді спостерігається калієвий польовий шпат. З темноколірних мінералів визначено діопсид, актиноліт, актиноліт-рибекітовий амфібол та рибекіт, подекуди флогопіт і епідот. Основна маса породи є войлокоподібною сумішшю альбіту, сфену, актиноліту (або діопсиду) з дещо крупнішими виділеннями магнетиту. Зустрічаються релікти ільменіту і титаномагнетиту. Колір породи залишається темно-зеленим, але додається характерний синюватий відтінок. У випадках непорушених контактів (наприклад, див. пробу 11Д) у крайових частинах дайок спостерігаються малопотужні ділянки (до 10–20 мм) зі смугастою текстурою, де окремі смужки мають різне забарвлення — від синювато-зеленого, синювато-сірого до сіро-рожевого і світло-сірого — в напрямі від базитової породи до грани-

ці з апогранітним альбітитом. Світлозабарвлені приконтакткові смужки (перші міліметри) апобазитів складені істотно альбітовою породою. Слід відзначити, що суміжні апогранітні і аподіабазові метасоматити складені мінеральними асоціаціями, що належать певному температурному рівню вертикальної зональності апогранітоїдних альбітитів [4, 5]. Наприклад, було показано [3, 7], що на контакті з актинолітовим альбітитом аподіабазовий метасоматит має сфен-актиноліт-альбітовий склад з накладеним магнетитом, а на контакті з діопсидовим альбітитом замість актиноліту спостерігається кальцієвий клінопіроксен. У межах ореола апогранітних лужних натрієвих метасоматитів аподіабазис часто перетинаються тонкими прожилками альбіт-епідотового з хлоритом складу, іноді також спостерігається калієвий польовий шпат, який виповнює тонкі (десяті й соті частки міліметра) січні тріщини.

Хімічний склад аподіабазів визначався по пробах, які відбирались (див. рис. 1) на деякій відстані від контакту дайки з оточуючими породами. Отже, отримані нами результати (табл. 1) характеризують хімічний склад внутрішніх частин дайок поза межами ділянок з вираженою смугастою текстурою. Це мало мінімізувати вплив структурно-текстурних і тектонодеформаційних неоднорідностей приконтакткових ділянок дайок на хімічні характеристики аподіабазів. Як випливає з наведених у табл. 1 даних, у послідовності від аподіабазів, відібраних серед слабодіафторованих гранітів (див. пробу 74Ф) — діафторитів (проба 39Д), а також серед альбітитів крайових частин метасоматичного ореола (див. проби 13Д, 9Д, 8Д, 43Д) — альбітитів центральної частини ореола (проби 10Д, 11Д), спостерігається збільшення вмісту Na_2O від 3,05 до 6,7% та SiO_2 від 45,74 до 49,31%. Масова частка інших компонентів відрізняється неістотно — в межах $\pm 0,5\text{--}2\%$ за виключенням проби 74Ф, для якої визначено мінімальні величини для TiO_2 , FeO (заг.), P_2O_5 та максимальні значення для Al_2O_3 , CaO , MgO . У порівнянні з іншими пробами аподіабазів (крім 74Ф) для проб 10Д, 11Д, взятих серед альбітитів центральної частини метасоматичного ореола, характерні мінімальні значення масової частки FeO (заг.), CaO й K_2O . Для останнього компонента в цілому є тенденція до зниження його вмісту в напрямі від периферичної до центральної частини метасоматичного ореола, якщо виключити з розгляду пробу 74Ф.

На мінеральному рівні зазначені особливості хімічного складу досліджених аподіабазів найяскравіше виявляються в заміщенні основного плагіоклазу альбітом (збільшення масових часток Na_2O й SiO_2). Інші компоненти переважно перерозподіляються з первинних мінералів діабазу в новоутворені CaO з лабродору, FeO й MgO з олівіну та клінопіроксену в новоутворені актиноліт або діопсид, а TiO_2 з первинного ільменіту у сфен. За петрографічними спостереженнями до числа новоутворених мінералів належить магнетит, що утворює відносно крупні ідіоморфні кристали, агрегати яких часто тяжіють до контакту аподіабазу з апогранітним альбітитом. Це, очевидно, вказує на часткове окиснення FeO і перерозподіл заліза з первинних Fe-Mg силікатів в оксидну фазу. Al_2O_3 зберігає мінеральну форму в плагіоклазах (лабраторі й альбіті). Нерегулярний розподіл K_2O виявляється в появі флогопіту, який накладається на актиноліт (або діопсид) аподіабазів, а також тонких січних прожилків, виповнених мікрокліном.

Обговорення результатів. Дані, що викладені вище, а також результати, наведені в працях [3, 6, 7], дозволяють впевнено стверджувати те, що досліджені тіла порід основного складу є дайками, які січуть породи Новоукраїнського масиву. Це підтверджується формою залягання, а також наявністю зон загартування і ксенолітів оточуючих порід, що спостерігається для тіл, локалізованих як в межах ореола ЛНМ, так і поза його межами серед незмінених і слабозмінених новоукраїнських гранітів. В останньому випадку

Таблиця 1. Хімічний склад досліджених діабазів, %

| Проба | Компоненти | | | | | | | | | | | | | |
|-------|------------------|------------------|--------------------------------|------------|------|------|------|-------------------|------------------|-------------------------------|------|------|------------------|------|
| | SiO ₂ | TiO ₂ | Al ₂ O ₃ | FeO (зар.) | MnO | MgO | CaO | Na ₂ O | K ₂ O | P ₂ O ₅ | S | Cl | H ₂ O | ВПП* |
| 74Ф | 45,91 | 1,19 | 16,09 | 11,95 | 0,15 | 6,78 | 9,15 | 3,05 | 0,67 | 0,18 | 0,11 | 0,01 | 0,55 | 2,21 |
| 43Д | 45,65 | 2,93 | 12,42 | 17,34 | 0,13 | 3,30 | 5,35 | 4,66 | 2,82 | 1,28 | 0,11 | 0,03 | 0,63 | 1,61 |
| 8Д | 45,16 | 2,77 | 12,52 | 17,27 | 0,16 | 3,34 | 5,29 | 4,22 | 2,60 | 1,11 | 0,08 | 0,02 | 1,02 | 2,08 |
| 9Д | 46,92 | 3,03 | 12,74 | 17,38 | 0,17 | 3,41 | 4,78 | 4,61 | 2,42 | 1,07 | 0,09 | 0,03 | 0,35 | 1,57 |
| 10Д | 47,96 | 2,81 | 13,08 | 15,10 | 0,11 | 3,40 | 4,69 | 6,04 | 1,70 | 1,16 | 0,08 | 0,02 | 0,94 | 1,16 |
| 11Д | 49,31 | 2,77 | 12,65 | 14,45 | 0,10 | 3,12 | 4,98 | 6,70 | 0,91 | 1,12 | 0,06 | 0,01 | 0,77 | 1,35 |
| 13Д | 47,43 | 2,90 | 13,12 | 16,17 | 0,16 | 3,51 | 5,04 | 4,59 | 1,92 | 1,11 | 0,09 | 0,02 | 0,32 | 2,01 |
| 39Д | 45,74 | 3,26 | 12,27 | 16,62 | 0,16 | 3,28 | 4,84 | 3,66 | 2,99 | 1,08 | 0,09 | 0,03 | 0,71 | 2,80 |

*Втрата при прожарюванні.

структурно-текстурні і речовинні (в тому числі парагенетичні) характеристики досліджених основних порід відповідають діагностичним ознакам діабазів. Умови залягання дослідженої субгоризонтальної дайки (див. рис. 1) дали змогу встановити структурно-текстурні і речовинні перетворення діабазів, які складають це суцільне тіло основних порід, залежно від розміщення дайки відносно ореола апогранітних ЛНМ.

Уся сукупність отриманих нами результатів, а також наведених у [3, 6, 7] показує, що в межах вказаного ореола: по-перше, дайкові породи втрачають діабазову структуру; по-друге змінюють мінеральний склад, набуваючи ознак апобазитової породи істотно альбіт-актинолітового або альбіт-діопсидового складу; по-третє, поблизу непорушених контактів з апогранітними альбітитами апобазити набувають смугастої текстури, що інтерпретується як метасоматична колонка [3, 7], яка завершується на контакті з апогранітними альбітитами зоною істотно альбітових порід; по-четверте, до складу апобазитів смугастої приконтрактової ділянки входять типоморфні мінерали ЛНМ — альбіт, а також темнокольорні — актиноліт, рибекітові амфіболи або діопсид у відповідності з мінеральним типом суміжних апогранітних альбітитів.

Хімічний склад внутрішніх частин дайки змінюється залежно від її положення відносно зональної будови ореола ЛНМ, що виявляється насамперед у збільшенні масових часток Na_2O й SiO_2 у напрямі від периферичних частин ореола, складених діафторованими гранітами, до його центральних ділянок, представлених повно проявленими ЛНМ (альбітитами).

Таким чином, відзначені вище закономірності переконливо свідчать про наявність метасоматичного перетворення дайок основного складу, що локалізовані в межах метасоматичних тіл, складених апогранітними альбітитами Новоукраїнського масиву. Ці перетворення мають усі ознаки продуктів ЛНМ і, отже, визначають відносний вік дослідженого дайкового комплексу в період між формуванням гранітоїдів Новоукраїнського масиву (≈ 2 млрд років) та утворенням ураноносних альбітитів ($\approx 1,8$ млрд років), що належать до формації ЛНМ зон глибинних розломів [4]. Викладене вище підтверджує точку зору про наявність доальбітитового комплексу дайок основного складу (Северинівський дайковий комплекс, за А. Н. Сухініним) у межах Новоукраїнського гранітоїдного масиву Інгульського мегаблока УЩ.

1. *Генетические* типы и закономерности размещения урановых месторождений Украины / Отв. ред. Я. Н. Белевцев, В. Б. Коваль. – Киев: Наук. думка, 1995. – 396 с.
2. *Тарханов А. В., Кудлаев А. Р., Петрин А. В., Козырьков В. Д.* Желтореченское ванадий-скандиевое месторождение // Геология руд. месторождений. – 1991. – № 6. – С. 50–56.
3. *Михальченко І. І.* Структурна позиція формації лужних натрієвих метасоматитів Новоукраїнського масиву: (Загальна та регіональна геологія): Автореф. дис. ... канд. геол. наук. 04.00.01. – Киев, 2012. – 20 с.
4. *Омельяненко Б. И.* Околорудные гидротермальные изменения пород. – Москва: Недра, 1978. – 214 с.
5. *Синицын В. А.* Минеральные реакции и метасоматическая зональность апогранитоидных ураноносных альбититов докембрия // Докл. АН УССР. Сер. Б. – 1991. – № 7. – С. 105–108.
6. *Иванов Б. Н., Михальченко И. И., Морозенко В. Р., Аширова И. И.* О взаимоотношении даек диабазов с натриевыми щелочными метасоматитами на примере Апрельского месторождения (западная часть Новокозантиновского урановорудного узла) // Тези доп. наук. конф. “Теоретичні питання і практика дослідження порід і руд (до 70-річчя Віктора Степановича Монахова)”, Київ, 14–16 бер. 2012 р. – Київ: Ін-т геохім., мінерал. та рудоутворення НАН України, 2012. – С. 35–36.
7. *Михальченко І. І., Синицын В. О.* Актинолітова фація апобазитових натрієвих лужних метасоматитів зон глибинних розломів // Геохімія та рудоутворення. – 2012. – Вип. 31. – С. 77–87.

8. Загородний В. В. Інструкція МВВ 74–12–97 “Методика виконання вимірювань масової долі основних петрогенних елементів в гірських породах рентгеноспектральним флуоресцентним методом”. – Київ. нац. ун-т ім. Тараса Шевченка, 1997. – 13 с.

КП “Кіровогеологія”, Київ
Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 21.03.2013

Б. Н. Иванов, И. И. Михальченко, В. А. Синицын, В. В. Загородний

Вещественное преобразование даек диабаз в ореоле апогранитных натриевых щелочных метасоматитов

Представлены данные о структурно-текстурном, минеральном и химическом преобразовании диабазов дайкового тела, задокументированного среди пород зонального ореола апогранитных щелочных натриевых метасоматитов (ЩНМ) и вмещающих гранитов Новоукраинского массива (Ингульский мегаблок Украинского щита). В частности, установлено существенное увеличение массовой доли Na_2O в породе дайкового тела, которое размещается последовательно среди гранитов и затем среди метасоматитов периферической и центральной частей метасоматического ореола. Полученные результаты подтверждают вывод о том, что исследованные дайки внедрились в породы Новоукраинского гранитоидного массива до образования пород формации ЩНМ центральной части Украинского щита.

B. N. Ivanov, I. I. Mikhalchenko, V. A. Sinitsyn, V. V. Zagorodniy

Mineral and chemical transformations of diabase dykes within the halo of apogranitic alkaline sodium metasomatites

The results concerning the changes in structure features and in the mineral and chemical compositions of diabase dykes located within a zoned halo of apogranitic alkaline sodium metasomatites and parent granites of the Novoukrainka massif (Inguletsky megablock of the Ukrainian shield) are presented. In particular, it has been shown that the mass fraction of Na_2O in the rock of a single dyke is increasing, depending on the dyke location within granites, and then within metasomatites of the peripheral and central parts of the halo. The results confirm that the studied dykes intruded in the Novoukrainka granites before the formation of uranium-bearing albitites related to the family of alkaline sodium metasomatites of the central part of the Ukrainian shield.

Т. Я. Шульга

Исследование стационарного движения стратифицированной жидкости, вызываемого действием ветра в Азовском море

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Л. В. Черкесовым)

На основании аналитического решения задачи ветрового стационарного движения вязкой двухслойной жидкости изучено двумерное течение, вызываемое действием постоянного ветра в Азовском море. Установлены зависимости изменения скорости жидкости при снижении температуры верхнего и нижнего слоев, а также с ростом глубины верхнего слоя. Полученное решение позволяет оценить положение плоскости раздела двух слоев в Азовском море и является тестом для численных расчетов течений двухслойной жидкости.

Модели ветрового движения двухслойной жидкости находят широкое применение при расчетах характеристик течений в неоднородных по температуре водоемах. Морфологические особенности донной поверхности Азовского моря заключаются в том, что наряду с относительно глубоководными районами имеют место и большие по площади области мелководья (прибрежные зоны, лиманы, заливы), глубины которых соизмеримы с величиной перепада уровня воды при сгонно-нагонных явлениях. При этом используются методы математического моделирования происходящих в нем гидрофизических процессов, связанные с переходом к σ -координатам [1, 2].

В настоящем сообщении представлено полученное нами аналитическое решение стационарной задачи ветрового движения вязкой двухслойной жидкости в бассейне, где верхний слой соответствует мелководью, а нижний — глубоководной части. Выполнен анализ результатов, позволяющий найти оценки величин входящих сюда параметров, адекватно отражающих гидрофизические процессы в бассейне, содержащем обширные мелководные и глубоководные районы.

1. Рассмотрим стационарное ветровое движение стратифицированной жидкости с учетом турбулентного обмена в замкнутом прямоугольном бассейне ($0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, где $a = 4 \cdot 10^5$ м, $b = 3 \cdot 10^5$ м) постоянной глубины.

Пусть дно бассейна горизонтально ($H = 14$ м), верхний и нижний слои жидкости однородны, но с разными плотностями; коэффициенты вертикального турбулентного обмена постоянны в каждом слое, но не равны между собой. Горизонтальная плоскость, отстоящая от невозмущенной поверхности водоема на глубине (H_1), разделяет исходную область на две подобласти: мелководный верхний слой (I) и глубоководный слой (II). Движение жидкости в слое I вызывается ветром, а в слое II градиентом давления и течением в первом слое.

Стационарное движение жидкости в линейном приближении при достаточно малых скоростях ветра описывается следующими уравнениями мелкой воды [3, 4]:

$$\frac{\partial \zeta_1}{\partial x} - f v_1 = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^1 \frac{\partial u_1}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial \zeta_1}{\partial y} + f u_1 = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^1 \frac{\partial v_1}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 v_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_1}{\partial y^2} \right) \quad (2)$$

в слое I ($-H_1 \leq z \leq 0$);

$$g \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{\partial \zeta_1}{\partial x} + g \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \frac{\partial \zeta_2}{\partial x} - f v_2 = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^2 \frac{\partial u_2}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial y^2} \right), \quad (3)$$

$$g \frac{\rho_1}{\rho_2} \frac{\partial \zeta_1}{\partial y} + g \left(1 - \frac{\rho_1}{\rho_2} \right) \frac{\partial \zeta_2}{\partial y} + f u_2 = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^2 \frac{\partial v_2}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 v_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v_2}{\partial y^2} \right) \quad (4)$$

в слое II ($-H \leq z \leq -H_1$).

Здесь индекс "1" относится к верхнему слою жидкости, индекс "2" — к нижнему; x, y, z — оси прямоугольной системы координат. Ось z направлена вертикально вверх; $u_{1,2}(x, y, z)$, $v_{1,2}(x, y, z)$ — компоненты вектора скорости течения; K_M^1, K_M^2 — коэффициенты вертикального турбулентного обмена; g — ускорение свободного падения; f — параметр Кориолиса; ζ_1 и ζ_2 — отклонение поверхности жидкости и границы раздела слоев от плоскостей $z = 0$ и $z = -H_1$ соответственно; ρ_1 и ρ_2 — постоянные плотности воды; A_M — коэффициент горизонтального турбулентного обмена.

На вертикальных стенках бассейна выполняются условия прилипания: при $z = 0$, $z = -H_1$ и $z = -H$ граничные условия для уравнений (1)–(4) имеют вид [3, 4]:

$$\rho_1 K_M^1 \left(\frac{\partial u_1}{\partial z}, \frac{\partial v_1}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = (\tau_{0x}, \tau_{0y}), \quad w_1|_{z=0} = 0, \quad w_1|_{z=-H_1} = 0, \quad (5)$$

$$\rho_2 K_M^2 \left(\frac{\partial u_2}{\partial z}, \frac{\partial v_2}{\partial z} \right) \Big|_{z=-H_1} = (\tau_{bx}, \tau_{by}), \quad w_2|_{z=-H_1} = 0, \quad w_2|_{z=-H} = 0. \quad (6)$$

Граничные условия между слоями жидкости задаются в соответствии с [4]:

$$\rho_1 K_M^1 \left(\frac{\partial u_1}{\partial z}, \frac{\partial v_1}{\partial z} \right) \Big|_{z=-H_1} = \rho_2 K_M^2 \left(\frac{\partial u_2}{\partial z}, \frac{\partial v_2}{\partial z} \right) \Big|_{z=-H_1}, \quad (7)$$

$$u_1|_{z=-H_1} = u_2|_{z=-H_1}, \quad v_1|_{z=-H_1} = v_2|_{z=-H_1}.$$

Здесь τ_{0x}, τ_{0y} — составляющие тангенциального напряжения ветра $\bar{\tau}$ на свободной поверхности ($\tau_{0x} = \rho_a C_a |\mathbf{W}| W_x$; $\tau_{0y} = \rho_a C_a |\mathbf{W}| W_y$), где \mathbf{W} — вектор скорости приводного ветра; ρ_a — плотность атмосферы; коэффициент поверхностного трения $C_a = k^2 (14.56 - 2 \ln |\mathbf{W}| / W_0)^{-2}$ определяется согласно [1, 2] ($W_0 = 1$ м/с — нормирующий множитель); $\bar{\tau}_b = (\tau_{bx}, \tau_{by})$ — вектор напряжения на дне, составляющие которого определяются по логарифмическому закону: ($\tau_{bx} = \rho_0 C_b |\mathbf{U}_b| u_b$; $\tau_{by} = \rho_0 C_b |\mathbf{U}_b| v_b$); C_b — коэффициент придонного трения ($C_b = \left[\frac{1}{k} \ln \left(\frac{H + z_b}{z_b} \right) \right]^{-2}$); z_b — точка вблизи дна, $\mathbf{U}_b = (u_b, v_b)$ — скорость течения жидкости в этой точке.

Умножим каждое уравнение (3), (4) на i и прибавим к соответствующим уравнениям (1), (2). Введем при этом обозначения [4]:

$$U_1 = u_1 + i v_1; \quad U_2 = u_2 + i v_2; \quad \tau = \tau_{0x} + i \tau_{0y}. \quad (8)$$

В стационарном движении при сравнительно небольших скоростях ветра изменения уровней свободной поверхности и поверхности раздела по горизонтальным координатам

сравнительно малы и ими можно пренебречь. Воспользовавшись представлением (8), объединим уравнения (1)–(4) в одну систему двух уравнений:

$$\begin{cases} -ifU_1 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^1 \frac{\partial U_1}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 U_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_1}{\partial y^2} \right) = 0, \\ -ifU_2 + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M^2 \frac{\partial U_2}{\partial z} \right) + A_M \left(\frac{\partial^2 U_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_2}{\partial y^2} \right) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Граничные условия (5)–(7) при этом переписутся следующим образом:

$$\begin{aligned} \rho_1 K_M^1 \frac{\partial U_1}{\partial z} \Big|_{z=0} = \tau, \quad \rho_1 K_M^1 \frac{\partial U_1}{\partial z} \Big|_{z=-H_1} = \rho_2 K_M^2 \frac{\partial U_2}{\partial z} \Big|_{z=-H_1}, \\ U_1|_{z=-H_1} = U_2|_{z=-H_1}, \quad \rho_2 K_M^2 \frac{\partial U_2}{\partial z} \Big|_{z=-H} = C_b U_2|_{z=-H}. \end{aligned} \quad (10)$$

Решение системы (9) ищем в виде периодических функций:

$$\begin{aligned} U_{nm}^1 &= (C_{nm}^1 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^1 z}) + C_{nm}^2 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^1 z})) \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{m\pi y}{b}, \\ U_{nm}^2 &= (\tilde{C}_{nm}^1 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^2 z}) + \tilde{C}_{nm}^2 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^2 z})) \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{m\pi y}{b}. \end{aligned} \quad (11)$$

При этом напряжения трения ветра представляем в виде:

$$\tilde{\tau}_{nm} = \sum_{n,m} \bar{\tau}_{nm} \sin \frac{n\pi x}{a} \cos \frac{m\pi y}{b}. \quad (12)$$

Система (9) с граничными условиями (10) для неизвестных функций (11) и напряжениями трения ветра в виде (12) преобразуется в четыре уравнения, которые позволяют определить неизвестные: C_{nm}^1 ; C_{nm}^2 ; \tilde{C}_{nm}^1 ; \tilde{C}_{nm}^2 :

$$\left\{ \begin{aligned} K_M^1 (C_{nm}^1 \sqrt{\alpha_{nm}^1} + C_{nm}^2 \sqrt{\alpha_{nm}^2}) &= \frac{\tau_{nm}}{\rho_1}, \\ \rho_1 K_M^1 \sqrt{\alpha_{nm}^1} (-C_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^1} H_1) + C_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^1} H_1)) &= \\ &= \rho_2 \sqrt{\alpha_{nm}^2} K_M^2 (-\tilde{C}_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^2} H_1) + \tilde{C}_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^2} H_1)), \\ C_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^1} H_1) + C_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^1} H_1) &= \\ &= \tilde{C}_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^2} H_1) + \tilde{C}_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^2} H_1), \\ \rho_2 K_M^2 \sqrt{\alpha_{nm}^2} (-\tilde{C}_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^2} H) + \tilde{C}_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^2} H)) &= \\ &= C_b (\tilde{C}_{nm}^1 \exp(-\sqrt{\alpha_{nm}^2} H) + \tilde{C}_{nm}^2 \exp(\sqrt{\alpha_{nm}^2} H)), \end{aligned} \right. \quad (13)$$

где

$$\alpha_{nm}^{1,2} = \sqrt{\left(A_M \left(\left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 + \left(\frac{m\pi}{b} \right)^2 \right) + if \right) / K_M^{1,2}}.$$

2. В рамках построенной модели выполнен расчет скоростей течений в прямоугольном бассейне, геометрия которого отображает параметры Азовского моря. Течения вызываются действием постоянного западного ветра со скоростью 5 м/с, направленного вдоль оси x . Целью численных экспериментов является исследование влияния величины вертикального турбулентного обмена, глубины верхнего слоя (H_1) и годового сезона на возникающие течения.

Расчеты проводились для значений параметров, которые уже использовались при моделировании динамики вод Азовского моря [5]. Так, $A_M = 10 \text{ м/с}^2$; $C_b = 2 \text{ кг/(м}^2 \cdot \text{с)}$; параметр Кориолиса соответствует 44° с. ш. ($f = 1,014 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$).

Параметризация коэффициентов вертикального турбулентного обмена в слоях бассейна осуществлялась на основе теории Прандтля–Обухова, учитывающей ветровое воздействие и географическое расположение бассейна [6]:

$$K_M(z) = \frac{(0,05h)^2 |\bar{\tau}|}{\rho_0 K_0} e^{-\alpha z}. \quad (14)$$

Здесь h — характерный размер области перемешивания, который находится по формуле $h = \pi \sqrt{K_0/2f}$; $\alpha = \sqrt{f/2K_0}$. При этом K_0 — коэффициент вертикального турбулентного обмена на свободной поверхности $\left(K_0 = \frac{(0,05\pi)^2 |\bar{\tau}|}{2\rho_0 f} \right)$.

Анализ результатов первой серии численных расчетов позволяет оценить влияние изменения температуры верхнего и нижнего слоев и, как следствие этого, изменения плотности воды на величины скоростей стационарных течений. Зависимость плотности (ρ) от температуры (T), солёности (S) и атмосферного давления (P) задавалась формулой Международного уравнения состояния морской воды [7]:

$$\rho(T, S, P) = \rho(T, S, 0) \left(1 - \frac{P}{K_\rho(T, S, P)} \right)^{-1}. \quad (15)$$

При расчете плотности (15) значение P принималось равным 1 атм (101 325 Па), значения T и S для расчета плотности подбирались на основании данных многолетних наблюдений температуры и солёности в Азовском море [8, 9]. Показано, что температура и плотность воды в Азовском море имеют хорошо выраженный годовой ход. В то же время солёность Азовского моря незначительна (10–12 ‰) и ее сезонные колебания не превышают 1 ‰. На основании этого, во всех численных экспериментах солёность в верхнем слое моря принимаем равной 10 ‰, в нижнем — 11 ‰.

Исследование стационарных течений проведено для трех характерных температурных сезонов: декабрь–март (температура воды в верхнем слое 3°C , в нижнем 0°C); апрель–август (температура воды в верхнем слое 25°C , в нижнем 18°C); сентябрь–ноябрь (температура воды в верхнем слое 10°C , в нижнем 6°C). При этом для указанных сезонов величина γ ($\gamma = 1 - \rho_1/\rho_2$) равна: $1,982 \cdot 10^{-3}$; $2,982 \cdot 10^{-3}$ и $1,984 \cdot 10^{-3}$ соответственно.

Максимальные значения скоростей течений на различных горизонтах, вызванных постоянным западным ветром скорости 10 м/с в зависимости от глубины верхнего слоя для трех годовых сезонов, демонстрирует табл. 1. Глубина верхнего слоя (H_1) в экспериментах варьировалась от 5 до 11 м. Из анализа данных, приведенных в таблице, следует, что понижение температуры верхнего и нижнего слоев приводит к уменьшению скорости жидкости. При этом по сравнению с холодным сезоном (декабрь–март) увеличение макси-

мумов скоростей течений не превышает 0,5% для теплого (апрель–август) и умеренного (сентябрь–ноябрь) сезонов.

Более существенное влияние на максимальные значения скоростей течений оказывает глубина верхнего слоя. Из данных, представленных в таблице, видно, что увеличение глубины на 6 м ($H_1 = 5$ и $H_1 = 11$ м) приводит к росту максимумов скоростей в верхних слоях: ($z = -1$ м) 5%; ($z = -5$ м) 15%; ($z = -7$ м) 2,5%, и к уменьшению максимумов скоростей в нижних слоях: ($z = -9$ м) 11% и ($z = -11$ м) 16%.

Поведение годографа скорости в зависимости от глубины верхнего слоя и плотностей, рассчитанных при различной температуре и солености (15), иллюстрирует рис. 1. Здесь приведены результаты расчетов в центре бассейна ($x = 200$ км; $y = 150$ км), найденные при значениях коэффициентов вертикального турбулентного обмена $K_M^1 = 1 \cdot 10^{-4}$ м²/с; $K_M^2 = 5 \cdot 10^{-5}$ м²/с для сезона декабрь – март ($\rho_1 = 1007,533$; $\rho_2 = 1009,695$ кг/м³). На рис. 1, а представлен годограф скорости течений, рассчитанный при глубине верхнего слоя равной 5 м. Для указанного сезона на рис. 1, б с целью сравнения приведены две линии годографов скорости: первая – при глубине верхнего слоя $H_1 = 5$ (см. также а на рис. 1) и вторая (линия отмеченная точками) – при глубине верхнего слоя $H_1 = 11$ м. На всех рисунках сплошная линия соответствует скорости течений в верхнем слое, штрих-пунктирная – в нижнем.

Из рис. 1, б видно, что увеличение глубины верхнего слоя приводит к тому, что в верхнем слое скорости становятся больше и их затухание происходит более резко. В нижнем слое $-H \leq z \leq -H_1$ значения скоростей и характер их стремления к нулю отличаются мало.

Следующая серия рисунков (рис. 2) иллюстрирует поведение скоростей стационарных течений на различных горизонтах: свободной поверхности ($z = 0$), на глубине раздела слоев ($z = -H_1$) и в придонном слое ($z = -H + 0,01$ м). Отсюда видно, что полученные решения позволяют выполнить их сравнение с известной спиралью Экмана. В рассматриваемом случае составляющая вектора скорости жидкости на поверхности бассейна отклоняется от

Таблица 1. Максимальные значения модуля скорости течений (см/с), вызванные постоянным западным ветром 10 м/с на различных горизонтах Азовского моря, в зависимости от глубины верхнего слоя (H_1) для трех годовых сезонов

| Годовой сезон | Горизонт, м | U_{\max} | | | |
|-----------------|-------------|-------------|-------------|-------------|--------------|
| | | $H_1 = 5$ м | $H_1 = 7$ м | $H_1 = 9$ м | $H_1 = 11$ м |
| Декабрь–март | 1 | 20,9 | 21,7 | 21,9 | 21,9 |
| | 5 | 9,4 | 10,3 | 10,8 | 11,0 |
| | 7 | 7,8 | 7,3 | 7,7 | 8,0 |
| | 9 | 7,0 | 6,6 | 6,2 | 6,3 |
| | 11 | 6,7 | 6,3 | 6,0 | 5,8 |
| Апрель–август | 1 | 21,0 | 21,8 | 22,0 | 22,0 |
| | 5 | 9,4 | 10,3 | 10,9 | 11,1 |
| | 7 | 7,8 | 7,4 | 7,8 | 8,0 |
| | 9 | 7,0 | 6,6 | 6,3 | 6,3 |
| | 11 | 6,7 | 6,4 | 6,0 | 5,8 |
| Сентябрь–ноябрь | 1 | 21,0 | 21,7 | 21,9 | 21,9 |
| | 5 | 9,4 | 10,3 | 10,8 | 11,1 |
| | 7 | 7,8 | 7,4 | 7,7 | 8,0 |
| | 9 | 7,0 | 6,6 | 6,3 | 6,3 |
| | 11 | 6,7 | 6,3 | 6,0 | 5,8 |

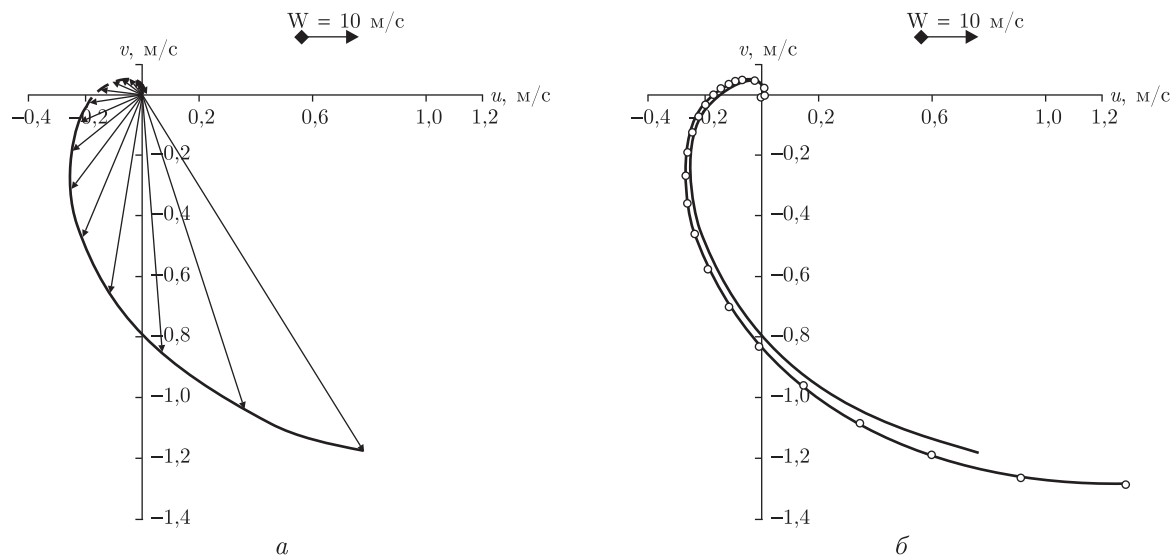


Рис. 1. Годографы скорости течения в центре бассейна $x = 200$ км; $y = 150$ км, вызванного постоянным западным ветром скорости 10 м/с, для сезона декабрь–март (сплошная линия соответствует верхнему слою, штрих-пунктирная нижнему): при глубине верхнего слоя $H_1 = 5$ м (а); при $H_1 = 5$ м и $H_1 = 11$ м (б) (линия, отмеченная кружками)

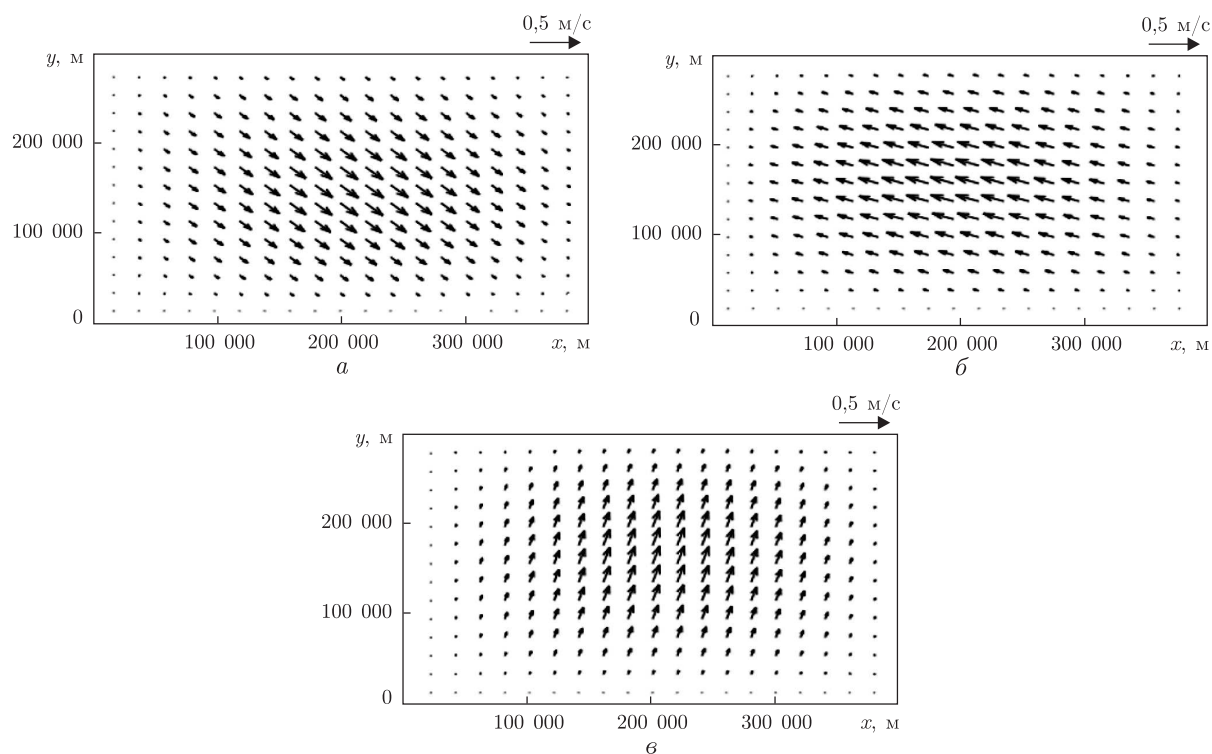


Рис. 2. Поля скоростей стационарных течений, вызванных постоянным западным ветром скорости 10 м/с при глубине верхнего слоя $H_1 = 7$ м: а — на свободной поверхности ($z = 0$); б — на глубине раздела слоев ($z = H_1$); в — в придонном слое ($z = -H + 0,01$ м)

направления ветра на 45° вправо (см. *a* на рис. 2) в северном полушарии. При этом направление течений у дна (см. *b* на рис. 2) противоположно их направлениям в поверхностном слое.

1. *Blumberg A. F., Mellor G. L.* A description of three dimensional coastal ocean circulation model in Three-Dimensional Coast Ocean Models // *Coast. Estuar. Sci.* – 1987. – 4. – P. 1–16.
2. *Фолин В. В.* Численная модель циркуляции вод Азовского моря // *Науч. тр. УкрНИГМИ.* – 2002. – Вып. 249. – С. 246–255.
3. *Черкесов Л. В., Иванов В. А., Хартиев С. М.* Введение в гидродинамику и теорию волн. – Санкт-Петербург: Гидрометеиздат, 1992. – 264 с.
4. *Компаниец Л. А., Якубайлик Т. В., Гаврилова Л. В., Гуревич К. Ю.* Модели экмановского типа в задачах гидродинамики. – Новосибирск: Наука, 2007. – 156 с.
5. *Иванов В. А., Черкесов Л. В., Шульга Т. Я.* Динамические процессы и их влияние на распространение и трансформацию загрязняющих веществ в ограниченных морских бассейнах. – Севастополь: НПЦ ЭКОСИ-Гидрофизика, 2010. – 178 с.
6. *Мамаев О. И.* Термохалинный анализ вод Мирового океана. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1987. – 338 с.
7. *UNESCO technical papers in marine science // UNESCO.* – 1988. – 54. – 86 p.
8. *Гидрометеорологический справочник Азовского моря.* – Ленинград: Гидрометеиздат, 1962. – 247 с.
9. *Гидрометеорология и гидрохимия морей СССР. Т. 5: Азовское море.* – Санкт-Петербург: Гидрометеиздат, 1991. – 234 с.

*Морской гидрофизический институт
НАН Украины, Севастополь*

Поступило в редакцию 19.03.2013

Т. Я. Шульга

Дослідження стаціонарного руху стратифікованої рідини, викликаного дією вітру в Азовському морі

На підставі аналітичного розв'язання задачі вітрового стаціонарного руху в'язкої двошарової рідини вивчено двовимірні течії, які спричинюються дією постійного вітру в Азовському морі. Встановлено залежності зміни швидкості рідини при зниженні температури верхнього і нижнього шарів, а також із зростанням глибини верхнього шару. Отриманий розв'язок дозволяє оцінити положення площини розділу двох шарів в Азовському морі та є тестом для математичних розрахунків течій двошарової рідини.

T. Ya. Shul'ga

Study of stationary currents of a stratified fluid caused by wind in the Sea of Azov

Based on the analytical solution of the problem of steady motion of a viscous two-layer fluid, the currents caused by a constant wind in the Sea of Azov are studied. The dependences of changes of the speed of the fluid at a variation in the temperatures of the upper and lower layers and at the increase of the top layer depth are established. The solution allows us to estimate the position of the plane of separation of the two layers in the Sea of Azov and is a test for the numerical calculations of currents in the two-layer fluid.



УДК:541.64:539.2

Т. Т. Алексеева, Ю. П. Гомза, И. С. Мартынюк, В. В. Клепко,
С. Д. Несин

Структурные особенности органо-неорганических ВПС на основе сетчатого полиуретана и Ti-содержащего сополимера

(Представлено членом-корреспондентом НАН Украины Ю. Ю. Керчой)

Методом малоуглового рентгеновского рассеяния изучены структурные особенности органо-неорганических взаимопроникающих полимерных сеток (ВПС) на основе сетчатого полиуретана и Ti-содержащего сополимера, синтезированного на основе 2-гидроксиэтилметакрилата и изопропоксида титана. Показано, что минимальное содержание фрагментов ($-TiO_2-$) равномерно распределяется в пределах областей, содержащих полигидроксиэтилметакрилат, а повышение Ti-компонента приводит к частичной его агрегации. Это сопровождается систематическим уменьшением периодичности пространственно-упорядоченной структуры и повышением общего уровня гетерогенности изученных органо-неорганических ВПС.

Органо-неорганические гибридные композиционные материалы являются предметом интенсивных исследований в последние несколько десятилетий. Значительный интерес к изучению таких полимерных композиционных материалов обусловлен потребностями развивающихся нанотехнологий в самых различных областях: от медицины до телекоммуникационных систем. Многие исследователи успешно демонстрируют синтез различных полимеров и сополимеров с включением неорганических структур на молекулярном уровне [1–3]. Подобные материалы отличаются повышенной механической прочностью, термической стабильностью и оптимальными параметрами теплопереноса.

Вызывает интерес синтез и исследования тройных гибридных взаимопроникающих полимерных сеток (ВПС) на основе сетчатого полиуретана (ПУ), ПММА и неорганического компонента (SiO_2), полученного из тетраэтоксисилана через золь-гель синтез *in situ* [4, 5]. Авторами получены высокопрозрачные гибридные материалы благодаря последовательности образования ПУ- и SiO_2 -составляющих ВПС, при этом микрофазовое разделение по данным SAXS происходит на наноуровне. Неорганическая фаза в тройных ВПС способствует улучшению механических и термических свойств.

© Т. Т. Алексеева, Ю. П. Гомза, И. С. Мартынюк, В. В. Клепко, С. Д. Несин, 2013

Интересные результаты получены в работе [6]. Авторы сообщают о пост-функционализации кластера $Ti_{16}O_{16}(OEt)_{32}$ полимеризующимися лигандами для обеспечения химической связи между неорганическим компонентом и органической матрицей посредством сополимеризации. Модификация посредством 2-гидроксиэтилметакрилата (ГЭМА) позволила ввести восемь метакрилатных групп и получить кластер $Ti_{16}O_{16}(OEt)_{24}(OC_2H_4Mc)_8$. Функционализированные кластеры были введены в два типа матриц: диметакрилатную (1), образующую частично гетерогенную сетку с высокой плотностью сшивки и полиГЭМА (2), образующую нешитую матрицу. По данным рентгеноструктурного анализа и трансмиссионной электронной микроскопии, равномерное распределение неорганической фазы достигается при низком содержании Ti кластеров (2,5% по массе), кластеры агрегируют с образованием структур с размерами порядка 30 нм. С увеличением содержания титана в диметакрилатной матрице размеры формирующихся кластерных агрегатов значительно возрастают, вплоть до 180 нм, распределение по размерам становится более полидисперсным. Вместе с тем повышение содержания Ti кластеров (19,2% по массе) в нешитой матрице полиГЭМА приводит к формированию компактных, практически однородно распределенных агрегатов с размерами — 50 нм. Показано, что введение незначительного количества Ti (2,5% по массе) приводит к значительному повышению прочности и термической стабильности (повышение температуры разложения на 70 °C) композитов.

Особое внимание привлекают ВПС на основе различных модификаций полититаноксида в связи с их уникальными электрическими, оптическими и химическими свойствами [7]. В основном работы ведутся по изучению свойств коллоидных растворов и наноструктурированных гибридных сред, созданных на основе наноразмерных частиц полититаноксида. Проблема несовместимости органической и неорганической составляющих при смешении различных по природе полимеров может быть решена путем синтеза таких гибридов, в которых возникали бы химические связи между компонентами. В этой связи перспективным представляется использование в качестве органического компонента мономера винилового ряда — ГЭМА, способного вступать в обменные реакции с неорганическим компонентом — изопропоксидом титана ($Ti(OPr^i)_4$), с образованием взаимопроникающих структур.

В работе [8] нами были изучены особенности формирования ВПС на основе сетчатого ПУ и органо-неорганического сополимера (ОНС) на основе 2-гидроксиэтилметакрилата и $Ti(OPr^i)_4$ методом ИК спектроскопии. Показано, что при синтезе органо-неорганических ВПС (ОН ВПС) образуются трехмерные сетчатые структуры с включением фрагментов ($-TiO_2-$) в полимерную цепь полигидроксиэтилметакрилата (ПГЭМА).

Целью настоящего исследования было изучение структурных особенностей органо-неорганических ВПС такого типа методом малоуглового рентгеновского рассеяния.

Экспериментальная часть. Исследуемые образцы исходной ВПС состава ПУ/ПГЭМА получали формированием сетчатого ПУ на основе макродиизоцианата (2,4-2,6-толуилендиизоцианат и полиоксипропиленгликоль М 1000) и триметилпропана в качестве сшивающего агента. После 15–20 мин перемешивания компонентов уретановой составляющей добавляли ГЭМА с предварительно растворенным инициатором — 2,2'-азо-бис-изобутиронитрилом (АИБН). Концентрация АИБН составляла 0,025 моль/л. ОН ВПС получали на основе того же ПУ и ОНС на основе ГЭМА и $Ti(OPr^i)_4$ при температуре 60 °C (10 ч) и 100 °C (2 ч). Соотношение ПУ/ПГЭМА в исходных и ОН ВПС составляло 50/50% по массе, а мольное соотношение ГЭМА/ $Ti(OPr^i)_4$ = 12/1, 8/1, 4/1. ВПС получали с использованием двух различных процедур образования полиуретанового компонента — без катализатора и в присутствии катализатора — дибутилдилаурат олова (ДБДЛО) для реакции уретанообразова-

ния. Концентрация ДБДЛО составляла $1,4 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Для сопоставления были синтезированы ОН ВПС с катализатором при мольном соотношении ГЭМА/Ti(OPrⁱ)₄ = 4/1. Полученные пленки ВПС вакуумировали до постоянной массы.

Структурно-морфологические особенности ОН ВПС исследовали методом малоуглового рентгеновского рассеяния. Профили малоуглового рассеяния рентгеновских лучей (МУРРЛ) были получены в вакуумной камере типа Кратки с использованием Си-излучения анода, монохроматизированного полным внутренним отражением Ni-фильтром [9]. Съемка проводилась в режиме пошагового сканирования сцинтилляционного детектора в диапазоне углов рассеяния от 0,03 до 4,0°, что соответствует величинам волнового вектора (q) от 0,022 до 2,86 нм⁻¹ ($q = 4\pi \sin \theta / \lambda$, θ — половина углов рассеяния, λ — длина волны рентгеновского излучения). При этом обеспечивается возможность изучения микрогетерогенных образований с размерами (которые определяются как $2\pi/q$) от 2 до 380 нм. Предварительная обработка кривых МУРРЛ проводилась с использованием программы FFSAXS [9, 10]. При этом использовались процедуры удаления фонового рассеяния камерой, нормирования рассеянной интенсивности до абсолютных единиц, введения коллимационной поправки, расчет среднего квадрата флуктуаций электронной плотности и трехмерных функций корреляции. Для проведения рентгенографических экспериментов использовались образцы в виде пленок. Макроскопические характеристики и значения среднего квадрата электронной плотности ($\Delta\rho^2$) исходных ПУ, ПГЭМА, ВПС и ОН ВПС приведены в табл. 1.

Результаты и их обсуждение. Кривые малоуглового рассеяния образцов исходных материалов — ПУ, ПГЭМА и ВПС состава ПУ/ПГЭМА 50/50% по массе иллюстрирует рис. 1, а. Кривая малоуглового рассеяния ПГЭМА (см. кривую 1) характеризуется низким уровнем рассеянной интенсивности при отсутствии интерференционных эффектов (имеет диффузный характер). Кривая малоуглового рассеяния ПУ (см. кривую 2) характеризуется отсутствием явно выраженных интерференционных эффектов (имеет близкий к диффузному характер), но проявляет признаки вырожденного интерференционного эффекта (указано стрелкой). Вершина этого максимума расположена вблизи значения волнового вектора 1,1 нм⁻¹, что соответствует значению пространственной периодичности областей микрофазового разделения около 5,7 нм⁻¹ (см. табл. 1). Для исходной ВПС характерен высокий уровень диффузного рассеяния, намного превышающий уровни рассеяния исходных компонентов ВПС в области значений волнового вектора рассеяния от минимального до 2,0 нм⁻¹.

Таблица 1. Параметры малоугловых пиков и значения среднего квадрата электронной плотности ($\Delta\rho^2$), рассчитанные по данным малоуглового рассеяния исходных ПГЭМА, ВПС на основе ПУ и ПГЭМА и ОН ВПС

| Образец | Массовое соотношение компонентов ПУ/ПГЭМА / TiO ₂ , % | Мольное соотношение ГЭМА/Ti(OPr ⁱ) ₄ | Положение пика q_m , нм ⁻¹ | Периодичность пика $2\pi/q_m$, нм | $\Delta\rho^2 \cdot 10^3$, моль ² /см ⁶ | $\Delta\rho^2$, эл ² /нм ⁶ |
|------------|------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------|-----------------------------------------|------------------------------------|----------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------|
| ПГЭМА | 0/100/0 | — | | | 0,327 | 129 |
| ПУ | 100/0/0 | — | 1,1 | 5,7 | | |
| ВПС | 50/50/0 | — | | | 0,445 | 175 |
| ОНВ-1 | 48,875/48,875/2,250 | 12/1 | 0,65 | 9,7 | 0,892 | 351 |
| ОНВ-2 | 48,3/48,3/3,4 | 8/1 | 0,70 | 9,0 | 1,070 | 421 |
| ОНВ-3 | 47,2/47,2/5,6 | 4/1 | 0,80 | 7,9 | 2,590 | 1018 |
| ОНВ-4 с kt | 47,2/47,2/5,6 | 4/1 | 0,96 | 6,5 | 2,080 | 818 |

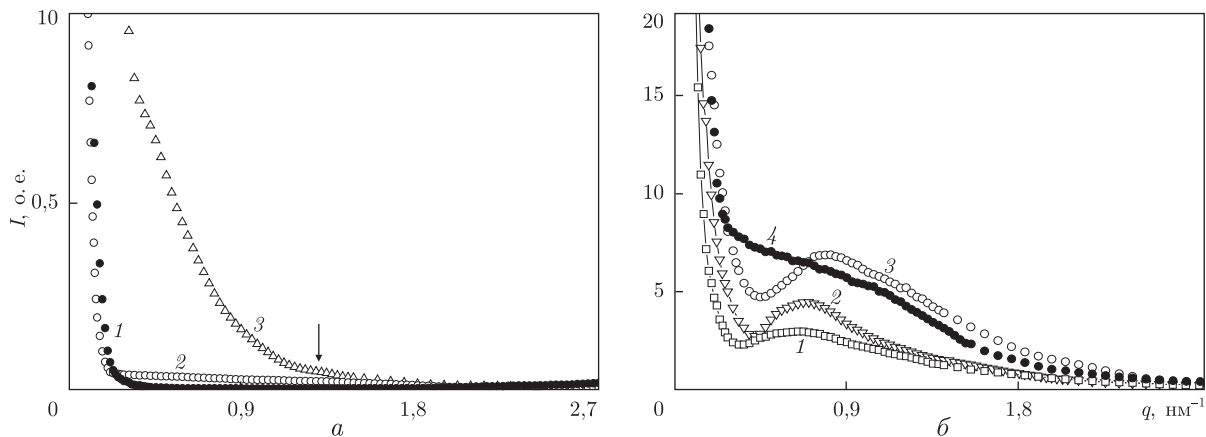


Рис. 1. Зависимость интенсивности рассеяния $I(q)$ от вектора рассеяния q : a — для исходных полимеров ПГЭМА (1), ПУ (2), ВПС (3); b — для органо-неорганических ВПС при варьировании содержания TiO_2 — ОНВ-1 (1), ОНВ-2 (2), ОНВ-3 (3), ОНВ-4 (4)

На экспериментальной кривой рассеяния исходной ВПС (см. a на рис. 1), также как и для исходных ПУ и ПГЭМА не наблюдается выраженных интерференционных эффектов. Как было показано в работе [10], при синтезе одновременных ОН ВПС на основе ПУ и Ti -содержащего сополимера образуются трехмерные сетчатые структуры с включением фрагментов $(-\text{TiO}_2-)$ в полимерную цепь ПГЭМА, в связи с этим анализировать особенности микрофазовой структуры ОН ВПС будем относительно второго компонента — Ti -содержащего сополимера. При минимальном содержании $\text{Ti}(\text{OPr}^i)_4$ (в пересчете на TiO_2 — 2,25% по массе) для образца ОНВ-1 на кривой SAXS (кривая 1 на рис. 1, b) наблюдается появление интерференционного максимума с вершиной, соответствующей периодичности 9,7 нм (см. табл. 1). Это соответствует модели структуры, в которой титансодержащие фрагменты практически равномерно распределяются в областях, содержащих ПГЭМА, с образованием пространственно-упорядоченной структуры.

С увеличением содержания фрагментов $(-\text{TiO}_2-)$ их равномерное распределение нарушается, что приводит к изменению периодичности (см. кривую 2 на рис. 1, b ; табл. 1). При мольном соотношении ГЭМА/ $\text{Ti}(\text{OPr}^i)_4 = 8/1$ повышается содержание TiO_2 до 3,4% по массе в образце ОНВ-2, при этом периодичность формирующейся системы уменьшается до 9,0 нм. Наблюдаемые значения периодичности можно в первом приближении считать соответствующими расстоянию между фрагментами полимерной цепи ПГЭМА, содержащими титан. При дальнейшем увеличении содержания фрагментов $(-\text{TiO}_2-)$ в образце ОНВ-3 (TiO_2 — 5,6% по массе) наблюдается уменьшение периодичности макрорешетки до 7,9 нм, сопровождающееся повышением общего уровня рассеянной интенсивности, что свидетельствует об агрегации фрагментов $(-\text{TiO}_2-)$ в рамках областей полимерной матрицы, состоящей из ПГЭМА (см. кривую 3 на рис. 1, b ; табл. 1).

При изменении кинетических условий синтеза (т.е. использование катализатора для реакции уретанобразования) Ti -содержащий сополимер образовывался в почти сшитой ПУ-матрице при максимальном содержании TiO_2 (образец ОНВ-4), наблюдается несколько отличный вид кривой малоуглового рассеяния относительно образца ОНВ-3, синтезированного без катализатора. Результатом изменения условий синтеза является заметное вырождение наблюдаемого на предыдущем образце ОНВ-3 дифракционного максимума,

что свидетельствует о значительном разрушении пространственно-периодической структуры. Кривая рассеяния образца ОНВ-4 приближается к диффузному виду, а сохранившийся слабовыраженный дифракционный максимум соответствует периодичности 6,5 нм.

Как известно [11], одной из наиболее важных количественных характеристик микрогетерогенной системы является значение среднего квадрата флуктуаций электронной плотности, что является мерой гетерогенности (мутности) системы в спектре рентгеновского излучения и характеризует общий уровень малоуглового рассеяния. Анализ значений параметра $\Delta\rho^2$ для исследуемых ОН ВПС указывает на повышение общего уровня гетерогенности с увеличением содержания Ti-содержащего компонента (см. табл. 1), что указывает на увеличение мутности в спектре рентгеновского излучения. Для образца ОНВ-4, синтезированного с катализатором, этот параметр ниже, чем для образца ОНВ-3, полученного без катализатора, но с одинаковым содержанием Ti-компонента. Это, вероятно, можно объяснить фиксацией системы на более раннем этапе микрофазового разделения.

Таким образом, проведенные исследования показали, что введение металлсодержащих фрагментов в ВПС существенно модифицирует гетерогенную структуру материала. Минимальное содержание фрагментов ($-\text{TiO}_2-$) равномерно распределяется в пределах областей, содержащих ПГЭМА, а повышение Ti-компонента приводит к частичной его агрегации. Это сопровождается систематическим уменьшением периодичности пространственно-упорядоченной структуры и повышением общего уровня гетерогенности изученных ОН ВПС.

1. *Wu C. S.* In situ polymerization of titanium isopropoxide in polycaprolactone: properties and characterization of the hybrid nanocomposites // *J. Appl. Polym. Sci.* – 2004. – **92**. – P. 1749–1757.
2. *Серов В. Г., Гомза Ю. П., Литвяков В. И. и др.* Изучение структурных особенностей новых органо-неорганических гибридных наноматериалов с использованием рентгенографических методов // *Укр. хим. журн.* – 2009. – **75**, № 3. – С. 66–71.
3. *Zhang J., Wang B., Ju X. et al.* New observations on the optical properties of PPV/TiO₂ nanocomposites // *Polymer* – 2001. – **42**. – P. 3697–3702.
4. *Bonilla G., Martinez M., Mendoza A. M., Widmaier J.-M.* Ternary interpenetrating networks of polyurethane-poly(methyl methacrylate)-silica: Preparation by the sol-gel process and characterization of films // *European Polymer Journal*. – 2006. – **42**. – P. 2977–2986.
5. *Widmaier J. M., Bonilla G.* In situ synthesis of optically transparent interpenetrating organic/inorganic networks // *Polym. Adv. Technol.* – 2006. – **17**. – P. 634–640.
6. *Trabelsi S., Janke A., Hassler R. et al.* Novel Organo-Functional Titanium-oxo-cluster-Based Hybrid Materials with Enhanced Thermomechanical and Thermal Properties // *Macromolecules*. – 2005. – **38**. – P. 6068–6078.
7. *Sanchez C., Soler-Illia A. A., Ribot F. et al.* Designed Hybrid Organic-Inorganic Nanocomposites from Functional Nanobuilding Blocks // *Chem. Mater.* – 2001. – **13**, No 10. – P. 3061–3083.
8. *Алексеева Т. Т., Менжесерс Г. Я., Мартинюк І. С. та ін.* Спектральні дослідження формування взаємопроникних полімерних сіток на основі сітчастого поліуретану та органо-неорганічного кополімеру // *Вопр. хімії і хім. технології*. – 2012. – № 3. – С. 54–59.
9. *Липатов Ю. С., Шилов В. В., Гомза Ю. П., Кругляк Н. Е.* Рентгенографические методы изучения полимерных систем. – Киев: Наук. думка, 1982. – 296 с.
10. *Vonk C. G.* FFSAXS's Program for the Processing of Small-Angle X-ray Scattering Data. – Geleen: DSM, 1975. – 83 p.
11. *Bonatr R., Muller E. H.* Phase separation in urethane elastomers as judged by low-angle X-ray scattering. *J. Fundamentals* // *J. Macromol. Sci. B.* – 1974. – **10**. – P. 177–189.

Т. Т. Алексєєва, Ю. П. Гомза, І. С. Мартинюк, В. В. Клепко, С. Д. Несін

Структурні особливості органо-неорганічних ВПС на основі сітчастого поліуретану та Тi-вмісного кополімеру

Методом малокутового рентгенівського розсіяння вивчено структурні особливості органо-неорганічних взаємопроникних полімерних сіток (ВПС) на основі сітчастого поліуретану і Тi-вмісного кополімеру, синтезованого на основі 2-гідроксіетилметакрилату й ізопропоксиду титану. Показано, що мінімальний вміст фрагментів ($-\text{TiO}_2-$) рівномірно розподіляється в межах областей, що містять полігідроксіетилметакрилат, а підвищення Тi-компонента призводить до часткової його агрегації. Це супроводжується систематичним зменшенням періодичності просторово-впорядкованої структури та підвищенням загального рівня гетерогенності вивчених органо-неорганічних ВПС.

T. T. Alekseeva, Yu. P. Gomza, I. S. Martynyuk, V. V. Klepko, S. D. Nesin

Structural peculiarities of the organic-inorganic IPN based on crosslinked polyurethane and Ti-containing copolymer

Structural features of the organic-inorganic interpenetrating polymer networks (IPN) based on crosslinked polyurethane and Ti-containing copolymer based on 2-hydroxyethylmethacrylate and titanium isopropoxide have been studied by the method of small-angle x-ray diffraction. It is shown that the minimum content of fragments ($-\text{TiO}_2-$) is uniformly distributed within the areas containing polyhydroxyethylmethacrylate, and an increase of the Ti-component leads to its partial aggregation. It is accompanied by the systematic reduction of periodicity of the spatial ordered structure and an increase of the general level of heterogeneity of the studied organic-inorganic IPN.

О. А. Запорожець, Т. Є. Кеда, Л. В. Коваленко, Л. І. Тилтіна,
В. В. Сухан

Імобілізований

1-(4-адамантил-2-тіазолілазо)-2-нафтол — твердофазний реагент на цинк (II)

(Представлено членом-кореспондентом НАН України М. С. Слободяником)

Досліджено взаємодію іммобілізованого на поверхні силікагелю 1-(4-адамантил-2-тіазолілазо)-2-нафтолу з цинком (II). Встановлено, що кількісне вилучення Zn(II) модифікованим сорбентом відбувається при рН розчину $\geq 5,0$. Показано перспективність застосування модифікованого сорбенту як готової аналітичної форми для твердофазно-спектрофотометричного і візуального тест-визначення 0,03–0,98 мг/л Zn(II) у високомінералізованих об'єктах, зокрема біологічних рідин.

Дослідження останніх років показали, що перспективними для визначення мікрокількостей металів у різноманітних об'єктах є комбіновані методи, що поєднують сорбційне концентрування аналіту з подальшим його детектуванням безпосередньо в фазі сорбенту. Такий підхід дає змогу підвищити чутливість і вибірковість визначення, а також позбутись матричного впливу [1, 2]. Серед запропонованих сорбційно-спектроскопічних і візуальних тест-методик (ВТ) визначення іонів металів найбільшою вибірковістю вирізняються ті, що базуються на застосуванні модифікованих силікагелів (СГ). Утім більшість з них є мало-придатними для аналізу високомінералізованих матриць, зокрема біологічних рідин. Тому задача створення експресних, простих і водночас чутливих і вибіркових методик сорбційно-спектроскопічного і ВТ визначення іонів металів, зокрема у високомінералізованих об'єктах, залишається актуальною.

1-(4-Адамантил-2-тіазолілазо)-2-нафтол (НР) відомий як гетарилазореагент для спектрофотометричного визначення мікрокількостей Cu(II), Ni(II) й Zn(II). Імобілізацією НР на поверхні силікагелю адсорбцією з органічних розчинників розроблено твердофазний реагент (НР–СГ) для сорбційно-спектрофотометричного визначення Cu(II) у природних водах та візуального тест-визначення Cu(II) й Ni(II) у біологічних рідин [3–5].

В даному повідомленні представлено дослідження взаємодії Zn(II) з іммобілізованим на поверхні силікагелю НР з метою розробки методик твердофазно-спектрофотометричного (ТСФ) і ВТ визначення мікрокількостей цинку в біологічних рідин.

Для розробки твердофазного реагенту як матрицю було обрано мезопоруватий кремнезем — силікагель SG-60 ("Merck", Німеччина): $S_{\text{пит}} = 490 \text{ м}^2/\text{г}$, $d_{\text{пор}} = 6,0 \text{ нм}$, $\text{pH}_{\text{сусп}} = 7,5$. НР синтезували й очищали відповідно до методики [6], модифікацію силікагелю здійснювали за [7]. У ході дослідження використовували НР–СГ з ємністю за реагентом 1,5–2,0 мкмоль/г. Розчини Zn(II), Cu(II), Co(II), Ni(II) з концентрацією 1,0 мг/мл готували розчиненням наважок відповідних солей кваліфікації "х. ч." у 0,1 моль/л HNO₃ з подальшою стандартизацією за відомими методами [8].

У роботі використовували методи молекулярної і атомної спектроскопії, потенціометрії, адсорбції, твердофазної спектрофотометрії (ТСФ), кольорометрії (КМ) і стандартної

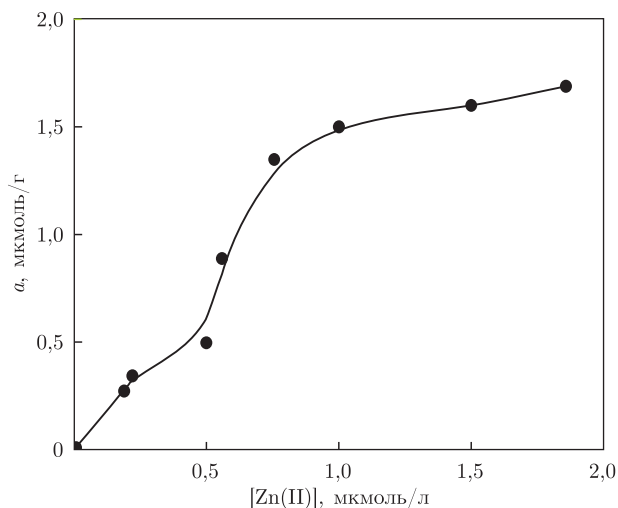


Рис. 1. Ізотерма сорбції Zn(II) HR-СГ. $V/m = 200$ мл/г; $a_{HR-СГ} = 1,5$ мкмоль/г; $pH = 5,0$; $T = 293,0 \pm 0,5$ К

кольорової шкали. Реєстрацію спектрів поглинання розчинів здійснювали на спектрофотометрі “UNICO 2800 UV/VIS” (США), “Specord M40” (Німеччина). Поглинання сорбентів у тонкому шарі вимірювали фотоелектроколориметром КФК-3 (Росія). Рівноважну або залишкову концентрацію Zn(II) у розчині визначали із застосуванням атомно-абсорбційного спектрометра “Сатурн” (Севеодонецьк) зі стандартним пальником та пропан-бутановим полум’ям, стандартна лампа з порожнистим катодом для цинку (ширина щілини 0,5 нм), $\lambda = 213,9$ нм.

Сорбцію іонів металів модифікованим кремнеземом вивчали за статичних умов. Для цього розчини солей металів об’ємом 10–100 мл перемішували магнітною мішалкою впродовж 0,5–30 хв з 0,020–0,150 г HR-СГ. Суспензію центрифугували, декантували розчин та реєстрували світлопоглинання сорбенту у тонкому шарі (0,10 см).

З метою встановлення оптимальних умов взаємодії Zn(II) з HR-СГ досліджували сорбцію цинку залежно від кислотності розчину, часу контакту фаз, концентрації металу в розчині, співвідношення об’єму проби та маси наважки. Встановлено, що кількісне вилучення Zn(II) модифікованим сорбентом відбувається при $pH \geq 5,0$, сорбційна рівновага в системі встановлюється впродовж ≥ 5 хв. Ізотерму сорбції Zn(II) наведено на рис. 1, з якого видно, що вона може бути віднесена до L3-типу, що свідчить про високу спорідненість Zn(II) до іммобілізованого HR. За оптимальних умов сорбції максимальний коефіцієнт розподілу становить 1,8 л/г при $V/m = 200$ мл/г.

Відомо [6], що у розчині Zn(II) взаємодіє з HR з утворенням комплексних сполук ZnR_2 й ZnR^+ при низькій і високій концентрації металу в розчині відповідно. Порівняння нормованих спектрів поглинання ацетонітрильних розчинів комплексних сполук ZnR_2 (крива 1 на рис. 2) і ZnR^+ (крива 2) і сорбентів HR-СГ до та після обробки розчинами Zn(II) різної концентрації (криві 3–5) вказує на утворення на поверхні HR-СГ комплексної сполуки найпростішої стехіометрії відповідно до схеми:



При цьому колір сорбенту змінюється від помаранчевого до буро-червоного і фіолетового залежно від концентрації Zn(II) у розчині. Поглинання модифікованих сорбентів

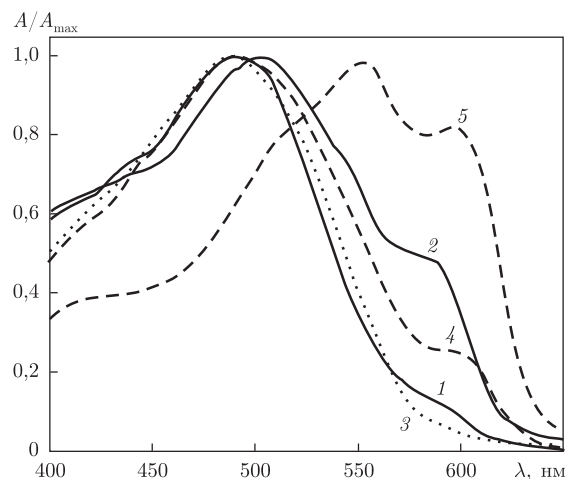


Рис. 2. Нормовані спектри поглинання комплексних сполук ZnR_2 (1) й ZnR^+ (2) в ацетонітрилі й сорбенту HR-СГ за відсутності (3) і після обробки розчинами $Zn(II)$ з концентрацією, мкмоль/л: 0,5 (4), 15,0 (5)

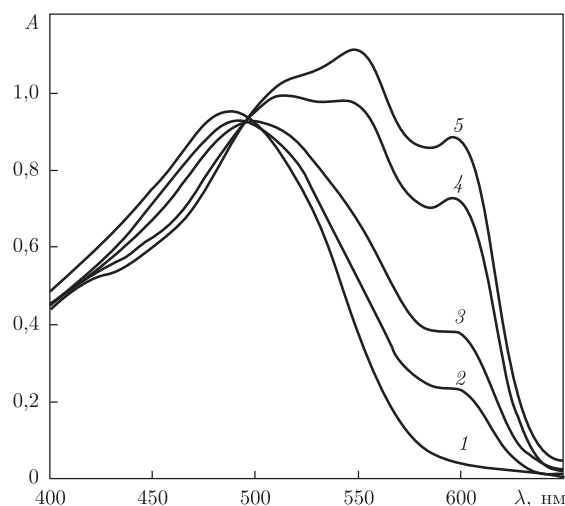


Рис. 3. Спектри поглинання сорбентів HR-СГ до (1) і після обробки розчинами $Zn(II)$ (2-5). C_{Zn} , мкмоль/л: 0 (1), 0,5 (2), 1,0 (3), 5,0 (4), 7,5 (5). рН 5,0, $a_{HR} = 2,0$ мкмоль/г, $V/m = 200$ мл/г

при $\lambda = 600$ нм (за умови найменшого поглинання “фону”) зростає зі збільшенням концентрації $Zn(II)$ у розчині (рис. 3), що було покладено в основу методик ТСФ і візуального тест-визначення $Zn(II)$.

Для отримання градуювального графіку і стандартної кольорової шкали серію розчинів об’ємом 15,0 мл з рН 5,0 і концентрацією цинку (II) від 0,5 до 15,0 мкмоль/л перемішували магнітною мішалкою з $0,075 \pm 0,001$ г HR-СГ ($a_{HR} = 2,0$ мкмоль/г) впродовж 5 хв. Сорбенти після розділення фаз відокремлювали декантацією, вміщували в кювету з $l = 0,10$ см та вимірювали спектр поглинання у діапазоні 400–750 нм. Як сорбент порівняння використовували суспензію немодифікованого силікагелю. Спектри поглинання сорбентів наведено на рис. 3.

Розрахунки проводили методом гетерохроматичної екстраполяції $\Delta A = (A_{600} - A_{700}) - (A_{600}^0 - A_{700}^0)$, де A_{600} й A_{600}^0 — поглинання модифікованого сорбенту при 600 нм від-

Таблиця 1. Заважаючий вплив сторонніх іонів на визначення 10,0 мкмоль/л Zn(II). $a_{HR} = 2,0$ мкмоль/г, рН 5,0, $V/m = 200$ мл/г

| Аніони | Не заважають кратні кількості | Катіони | Не заважають кратні кількості |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------|--------------------------------------------------------|----------------------------------|
| CH ₃ COO ⁻ | 1000 | K ⁺ , Na ⁺ | 1000 |
| Cl ⁻ , SO ₄ ²⁻ , NO ₃ ⁻ , C ₂ O ₄ ²⁻ | 100 | Ca ²⁺ , Mg ²⁺ | 100 |
| HPO ₄ ²⁻ | 10 | Cu ²⁺ , Ni ²⁺ , Co ²⁺ | 0,1 |

повідно в присутності/відсутності Zn(II), A_{700} й A_{700}^0 — поглинання сорбентів при 700 нм у присутності/відсутності Zn(II) відповідно. Рівняння градувального графіка ТСФ визначення Zn(II) з використанням HR–СГ має вигляд: $\Delta A = (0,23 \pm 0,04) + (0,089 \pm \pm 0,009) \cdot C_{Zn}$, мкмоль/л, $R = 0,980$. Межа виявлення, що розрахована за 3S-критерієм, становить 1,35 мкмоль/л (0,088 мг/л).

За даними спектрів поглинання сорбентів з використанням методу кольорометрії [9] були обраховані основні координати кольору. Крок стандартної кольорової шкали обирали згідно з рекомендаціями [1], зміна показника загальної кольорової відмінності ΔE на 10 відн. од. спостерігалась при концентрації Zn(II) у розчині, мг/л: 0,03, 0,06, 0,13, 0,33, 0,49, 0,98.

Результати дослідження впливу сторонніх іонів на визначення Zn(II) ТСФ й ВТ методами демонструє табл. 1. Як критерій впливу іонів, що заважають визначенню, обирали зміну аналітичного сигналу в спектрах поглинання сорбентів при введенні стороннього іона на $\pm 5\%$. Видно, що вибірковість визначення Zn(II) щодо аніонів є цілком достатньою для контролю цинку у високомінералізованих об'єктах, зокрема біологічних рідинах. Вміст Cu²⁺, Ni²⁺ й Co²⁺ у біологічних рідинах [10], зокрема сечі, не перевищує вміст, зазначений у таблиці, що свідчить про перспективність застосування іммобілізованого HR для аналізу таких об'єктів на вміст Zn(II).

Таким чином, проведені дослідження показали, що іммобілізований на силікагелі 1-(4-адамантил-2-тіазолілазо)-2-нафтол у слабкокислому середовищі (рН $\geq 5,0$) взаємодіє з Zn(II) з утворенням на поверхні інтенсивно забарвленої комплексної сполуки найпростішої стехіометрії. Світлопоглинання сорбентів ($\lambda = 600$ нм) зростає зі збільшенням концентрації цинку (II) у розчині, що покладено в основу методик ТСФ й ВТ визначення. Порівняно з кращим аналогом з літератури — іммобілізованим 1-(2-тіазолілазо)-2-нафтолом [11] твердофазний HR характеризується більшою стійкістю у високомінералізованому середовищі та вибірковістю і може бути застосований для визначення Zn(II), зокрема у біологічних рідинах.

1. Островская В. М., Запорожец О. А., Будников Г. К., Чернавская Н. М. Вода. Индикаторные системы. — Москва: ВИНТИ РАН, ЭКОНИКС, 2002. — 256 с.
2. Запорожець О. А. Адсорбовані на кремнеземах органічні реагенти у комбінованих спектроскопічних і тест-методах аналізу // Наук. зап. Київ. нац. ун-ту ім. Тараса Шевченка. — 2004. — 14. — С. 118–128.
3. Linnik R. P., Zaporozhets O. A. Solid-phase reagent for molecular spectroscopic determination of heavy metal speciation in natural water // Anal. Bioanal. Chem. — 2003. — 375. — P. 1083–1088.
4. Спосіб тест-визначення купруму (II). МПК G 01 № 21/29 / О. А. Запорожець, Т. Є. Кеда, М. В. Іщенко та ін. — № а2012-10795; Заяв. 14.09.2012.
5. Спосіб тест-визначення нікелю (II). МПК G 01 № 21/29 / О. А. Запорожець, Т. Є. Кеда, О. П. Яковчук. — № а2012-09454; Заяв. 02.08.2012.
6. Пилипенко А. Т., Пархоменко Е. А., Исаев С. Д. Изучение кислотно-основных свойств 4-адамантил-2-(2'-оксинафтилазо-1')-тиазола и взаимодействие реактива с катионами металлов // Укр. хим. журн. — 1976. — 42, № 7. — С. 741–744.

7. Запорожец О. А., Линник Р. П., Воловенко О. Б. Имобилизованный на кремнеземе АТАН в анализе сосуществующих форм меди в природных водах // Методы и объекты хим. анализа. – 2007. – **2**, № 1. – С. 40–50.
8. Коростелев П. П. Приготовление растворов для химико-аналитических работ. – Москва: Изд-во АН СССР, 1962. – 311 с.
9. Кириллов Е. А. Цветоведение. – Москва: Легпромбытиздат, 1987. – 128 с.
10. Tietz textbook of clinical chemistry and molecular diagnostics / C. A. Burtis, E. R. Ashwood, D. E. Bruns. – Amsterdam: Elsevier, 2006. – 2412 p.
11. Zaporozhets O. A., Petruniok N. I., Bessarabova O., Sukhan V. V. Determination of Cu(II) and Zn(II) using silica gel loaded with 1-(2-thiasolyazo)-2-naphthol // Talanta. – 1999. – **49**. – P. 899–906.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка
Національний університет харчових
технологій, Київ

Надійшло до редакції 18.02.2013

О. А. Запорожец, Т. Е. Кеда, Л. В. Коваленко, Л. И. Тылтина, В. В. Сухан

Имобилизованный 1-(4-адамантил-2-тиазолилазо)-2-нафтол — твердофазный реагент на цинк (II)

Исследовано взаимодействие иммобилизованного на поверхности силикагеля 1-(4-адамантил-2-тиазолилазо)-2-нафтола с цинком (II). Установлено, что количественное извлечение Zn(II) происходит при pH раствора $\geq 5,0$. Показана перспективность применения модифицированного сорбента как готовой аналитической формы для твердофазно-спектрофотометрического и визуального тест-определения 0,03–0,98 мг/л Zn(II) в высокоминерализованных объектах, в частности биологических жидкостях.

O. A. Zaporozhets, T. Ie. Keda, L. V. Kovalenko, L. I. Tyltina, V. V. Sukhan

Immobilized 1-(4-adamantyl-2-thiasolyl-azo)-2-naphthol as a solid-phase reagent for zinc(II)

The interaction of zinc(II) with 1-(4-adamantyl-2-thiasolyl-azo)-2-naphthol immobilized on a silica surface is studied. The quantitative recovery of Zn(II) is observed at pH ≥ 5.0 . The prospect of applications of the modified sorbent as a ready to use analytical form for sorption-spectroscopic and visual test determinations of 0.03–0.98 mg/l Zn(II) in highly mineralized samples, particularly in biological fluids, is established.

А. П. Косинская, Л. Н. Огниченко, А. Муатс, А. В. Кузьмина,
В. Б. Ларионов, В. Е. Кузьмин

QSAR-анализ проникающей способности органических веществ относительно поверхности гематоэнцефалического барьера

(Представлено академиком НАН Украины С. А. Андронатю)

Получены адекватные модели QSAR структура – $\log PS$ для органических соединений различных классов. Оценено относительное влияние различных физико-химических факторов и молекулярных фрагментов на проникающую способность молекул через гематоэнцефалический барьер.

Из всех гистогематических барьеров (гематоплацентарный, гематоофтальмический и др.) наибольшее внимание в изучении строения, функционирования, изменения барьерных показателей уделяется гематоэнцефалическому барьеру (ГЭБ). ГЭБ — физиологический барьер между кровеносной и центральной нервной системами. Главная функция ГЭБ — поддержание гомеостаза мозга; кроме того, он выполняет также функцию высокоселективного фильтра, через который из кровеносного русла в мозг поступают питательные вещества, а в обратном направлении выводятся продукты жизнедеятельности нервной ткани [1]. Для успешной терапии ряда заболеваний центральной нервной системы (ЦНС): (болезнь Альцгеймера, инсульты, опухоли мозга и др.) необходим быстрый и легкий доступ лекарственных средств из крови в мозг путем преодоления ГЭБ.

Одним из параметров, характеризующих проникновение веществ через ГЭБ, является величина поверхности проникновения (permeability surface) — $\log PS$, где P , $\text{см} \cdot \text{с}^{-1}$ — проницаемость капилляров; S , $\text{см}^2/\text{г}$ — площадь поверхности капилляров [2]. Применение теоретических методов (QSAR/QSPR) расчета величин, характеризующих проницаемость веществ через ГЭБ по структурам этих веществ, является достаточно актуальной задачей. Разработка новых препаратов для ЦНС более затруднительна, чем для лекарственных препаратов в целом, поскольку осуществить ее невозможно без изучения проницаемости ГЭБ. В настоящее время известно немного работ, посвященных оценке $\log PS$ методами QSAR, например [3]. Как правило, эти публикации базируются на частных примерах и малочисленных выборках, при этом модели QSAR не проверены на внешних тестовых выборках, кроме того, они не всегда интерпретируемы [4].

Целью настоящего сообщения было построение моделей QSAR с использованием симплексного подхода [5] и анализ влияния различных структурных факторов на проникновение веществ через ГЭБ для расширенной выборки данных по $\log PS$. Фактически данная работа — первое систематическое исследование влияния структуры соединений различных классов на параметр $\log PS$. Отличительной ее особенностью является также верификация и интерпретация результатов.

Объект исследования — выборка из 89 органических соединений с известным показателем $\log PS$ [4, 6]. Четырнадцать молекул из данного набора были отобраны в выборку

Таблица 1. Статистические характеристики моделей QSAR

| Модель | Число дескрипторов | R^2 | Q^2 | R_{ts}^2 | S_{ws} | S_{ts} | Y-Scrambling | |
|---------------------|--------------------|-------|-------|------------|----------|----------|-----------------|-----------------|
| | | | | | | | R_{Y-scr}^2 | Q_{Y-scr}^2 |
| 1 | 36 | 0,92 | 0,82 | 0,88 | 0,36 | 0,37 | $0,18 \pm 0,02$ | $0,08 \pm 0,02$ |
| 2 | 44 | 0,89 | 0,78 | 0,84 | 0,39 | 0,47 | $0,21 \pm 0,03$ | $0,10 \pm 0,02$ |
| 3 | 23 | 0,84 | 0,79 | 0,72 | 0,46 | 0,62 | $0,15 \pm 0,02$ | $0,04 \pm 0,02$ |
| 4 | 32 | 0,88 | 0,78 | 0,67 | 0,39 | 0,73 | $0,18 \pm 0,02$ | $0,08 \pm 0,02$ |
| 5 | 27 | 0,88 | 0,82 | 0,81 | 0,39 | 0,57 | $0,08 \pm 0,02$ | $0,08 \pm 0,02$ |
| Консенсусная модель | | 0,91 | — | 0,78 | — | 0,55 | — | — |

Примечание. R^2 — коэффициент детерминации для обучающей выборки; Q^2 — коэффициент детерминации в условиях скользящего контроля (leave-one-out); R_{ts}^2 — коэффициент детерминации для тестовой выборки; S_{ts} — стандартное отклонение для тестовой выборки; S_{ws} — стандартное отклонение для обучающей выборки; R_{Y-scr}^2 — коэффициент детерминации для процедуры *Y-scrambling*; Q_{Y-scr}^2 — коэффициент кросс-валидации для процедуры *Y-scrambling*.

для внешнего теста. Для этого молекулы были упорядочены, согласно значениям их $\log PS$, и затем каждая шестая молекула в этом ряду была отобрана во внешний тест. Для выборки из оставшихся семидесяти пяти молекул была проведена процедура пятикратной внешней кросс-валидации [5]. Для расчета структурных дескрипторов использовали симплексное представление молекулярной структуры (СПМС). Основой для описания в методе СПМС являются симплексы — четырехатомные фрагменты фиксированного состава, структуры [5]. Для построения моделей были использованы 2D* связанные симплексы, атомы в которых дифференцировали по типу, частичным зарядам, липофильности, поляризуемости, способности выступать донором/акцептором водородной связи, характеристикам вандерваальсовых взаимодействий [7–9].

Для установления связи структура — $\log PS$ применялся метод проекций на латентные структуры (PLS — Projection of Latent Structures) [10]. Для исключения возможности ложных корреляций использовалась процедура *Y-scrambling* — построение моделей методом случайного подбора коэффициентов [5].

В результате исследования получены адекватные модели QSAR с высокими статистическими показателями (табл. 1). Для прогноза и интерпретации использовалась консенсусная модель как результат пятикратной кросс-валидации [5]. На основе анализа вошедших в консенсусную модель структурных параметров было обнаружено, что проникновение веществ через ГЭБ в значительной степени обусловлено электростатическим фактором (32%). Вероятно, распределение зарядов на атомах существенно влияет на проникновение веществ через полярные зоны на поверхности ГЭБ. Гидрофобные параметры, природа атомов и вандерваальсовы взаимодействия играют также важную роль (22, 23 и 16% соответственно). Высокий вклад липофильности можно объяснить химической природой эндотелия, состоящего из фосфолипидов, что объясняет рост способности молекул преодолевать физиологические барьеры с увеличением их липофильности. Вандерваальсовы взаимодействия по всей вероятности определяют ориентацию молекул гидрофобными центрами к поверхности эндотелия ГЭБ.

В рамках симплексного подхода можно определить вклады различных молекулярных фрагментов в исследуемое свойство [5]. В результате такого анализа были выделены некоторые фрагменты молекул, способствующие или препятствующие проникновению веществ через ГЭБ (табл. 2). Отрицательно влияет на проникающую способность молекул наличие

*Учитывается только информация из структурных формул.

Таблица 2. Молекулярные фрагменты, влияющие на величину $\log PS$





| | |
|----------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Повышающие $\log PS$ | –F, –Cl, Alk, $N(C_2H_5)_2$  |
| Понижающие $\log PS$ | –COOH, –NH ₂ , –OH  ,  ,  |

Таблица 3. Прогноз $\log PS$ для внешней тестовой выборки

| Название молекул | $\log PS$ (эксперим.) | Consensus | Название молекул | $\log PS$ (эксперим.) | Consensus |
|-----------------------------|-----------------------|-----------|------------------|-----------------------|-----------|
| 3-Hydroxykynurenine | –4,49 | –4,32 | L-Glycine | –3,50 | –3,70 |
| Acomplia | –1,60 | –1,23 | Iodoantipyrine | –1,10 | –2,09 |
| Amantadine | –2,71 | –2,45 | L-Leucine | –4,08 | –3,35 |
| Bupropion | –1,52 | –1,88 | Methotrexate | –3,90 | –4,66 |
| Compound95005 | –2,11 | –1,72 | Phenytoin | –2,07 | –2,75 |
| Digoxin | –4,30 | –4,65 | Risperidone | –1,81 | –1,73 |
| Ethosuximide | –2,47 | –2,51 | Theobromine | –3,00 | –3,25 |
| $R_{\text{ex.ts}}^2 = 0,82$ | | | | | |

полярных групп, а также доноров водородной связи. В то же время наличие ароматических фрагментов, атомов галогенов, а также других фрагментов, повышающих липофильность молекулы, способствует росту их проникающей способности.

Нами было проведено внешнее тестирование на четырнадцать молекулах. Полученные результаты свидетельствуют о высокой предсказательной способности консенсусной модели ($R_{\text{ex.ts}}^2 = 0,82$) (табл. 3).

Таким образом, были получены адекватные и интерпретируемые модели QSAR с высокой прогнозирующей способностью параметра $\log PS$, характеризующего способность молекул проникать через ГЭБ. Как прикладной аспект данной работы планируется реализация соответствующих моделей QSAR в виде экспертной системы для медицинских химиков и фармакологов, разрабатывающих лекарственные препараты для центральной нервной системы.

1. *Pardridge W. M., Adenot M. A., Abraham M. H., Mayer U.* The Blood-Brain Barrier and Drug Delivery to the CNS. – New York: Springer, 2001. – 247 p.
2. *Dagenais C., Avdeef A., Tsinman O., Dudley A.* P-Glycoprotein Deficient Mouse *in situ* Blood-Brain Barrier Permeability and its Prediction using an in combo PAMPA Model // *Eur. J. Pharm. Sci.* – 2009. – **38**. – P. 121–137.
3. *Xingrong Liu, Meihua Tu, Rebecca S. Kelly* Development of a computational approach to predict blood-brain barrier permeability // *Cuiping Chen. Drug. Metab. Dispos.* – 2004. – **1**. – P. 132–139.
4. *Lanevskij K., Japertas P., Didziapetris R., Petrauskas A.* Ionization-Specific prediction of Blood-Brain Permeability // *J. Pharm. Sci.* – 2009. – **1**. – P. 122–134.
5. *Kuz'min V. E., Artemenko A. G., Muratov E. N. et al.* Virtual screening and molecular design based on hierarchical QSAR technology // In: *Recent Advances in QSAR Studies* / Eds. T. Puzyn, J. Leszczynski, M. Cronin. – London: Springer, 2010. – P. 127–176.
6. *Murakami H., Takanaga, Matsuo H., Ohtani H., Sawada Y.* Comparison of blood-brain barrier permeability in mice and rats using *in situ* brain perfusion technique // *Am. J. Phys. Heart Circ. Physiol.* – 2000. – **279**. – P. 1022–1029.
7. *Jolly, W. L., Perry W. B.* Estimation of atomic charges by an electronegativity equalization procedure calibration with core binding energies // *J. Am. Chem. Soc.* – 1973. – **95**. – P. 5442–5450.

8. Wang R., Fu Y., Lai L. A new atom-additive method for calculating partition coefficients // J. Chem. Inf. Comput. Sci. – 1997. – **37**. – P. 615–621.
9. Иоффе Б. В. Рефрактометрические методы химии. – Ленинград: Химия, 1983. – 350 с.
10. Rännar S., Lindgren F., Geladi P., Wold S. A PLS Kernel Algorithm for Data Sets with Many Variables and Fewer objects. Part 1: Theory and Algorithm // J. Chemometrics. – 1994. – **8**. – P. 111–125.

Фізико-хімічний інститут
и.м. А. В. Заболотного НАН України, Одеса

Поступило в редакцію 15.02.2013

**Г. П. Косінська, Л. М. Огніченко, А. Муатс, А. В. Кузьміна,
В. Б. Ларіонов, В. Є. Кузьмін**

QSAR-аналіз проникної здатності органічних сполук відносно поверхні гематоенцефалічного бар'єру

Отримано адекватні моделі QSAR структура – log PS для органічних сполук різних класів. Оцінено відносний вплив різних фізико-хімічних факторів і молекулярних фрагментів на проникну здатність молекул через гематоенцефалічний бар'єр.

**A. P. Kosinskaya, L. N. Ognichenko, A. Muats, A. V. Kuz'mina,
V. B. Larionov, V. E. Kuz'min**

QSAR analysis of blood-brain barrier permeability for organic compounds

Valid and robust QSAR models with high predictive ability for the permeation surface-product (PS) are obtained, and the relative influence of physico-chemical parameters and molecular fragments on the blood-brain barrier permeability is calculated.

О. О. Лозинський, Т. В. Шокол,
член-кореспондент НАН України В. П. Хиля

Взаємодія 7-гідрокси-8-формілхромонів і 8-іміно(оксо)-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-онів з нуклеофілами

*При обробці 7-гідрокси-8-формілхромонів з борогідридом натрію, амоніаком, амінами та гідроксиламіном реакція проходить виключно по формільній групі, натомість з надлишком гідразин-гідрату відбуваються нуклеофільне приєднання молекули гідразину по формільній групі та рециклізація γ -піронового кільця у піразольне. При нагріванні гідрозон димеризується в альдазин. При дії гідразин-гідрату на 8-іміно(оксо)-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-они відбувається розкриття як α -, так і γ -піронового циклів, виділяються ті ж самі гідрозон та альдазин, що і у випадку відповідного 7-гідрокси-8-формілхромону.*

Раніше було синтезовано ряд 7-гідрокси-8-формілізофлавонів та їх аналогів, з них за реакцією Кневенагеля з гетарилацетонітрилами отримано 8-іміно-9-гетарил-4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-они та 9-гетарил-4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діони [1–6].

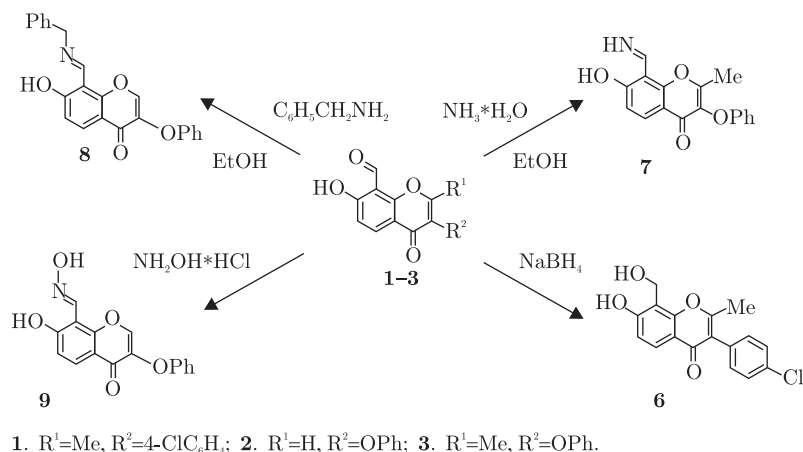
Мета цієї роботи полягала у вивченні реакцій 7-гідрокси-8-формілхромонів (1–3) з нуклеофільними агентами; встановлення особливостей взаємодії 7-гідрокси-8-формілхромонів, 8-іміно-9-гетарил-4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-онів (4) та 9-гетарил-4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діонів (5) з гідразин-гідратом.

Система 7-гідрокси-8-формілхромону включає три структурних фрагменти: γ -піроновий цикл, гідроксильну та формільну групи. В залежності від умов, властивості 7-гідрокси-8-формілхромонів можуть бути представлені як реакціями, що характерні суто для відповідної функціональної групи, так і реакціями, в яких бере участь система у цілому.

На прикладі 7-гідрокси-8-формілхромону **1** нами було проведено відновлення формільної групи до гідроксиметильної (сполука **6**) з використанням борогідриду натрію. Відновлення пройшло в м'яких умовах — при кімнатній температурі та атмосферному тиску, у гомогенному розчині з кількісним виходом, що наочно демонструє перевагу цього методу перед відновленням подібних сполук на діоксиді платини [7].

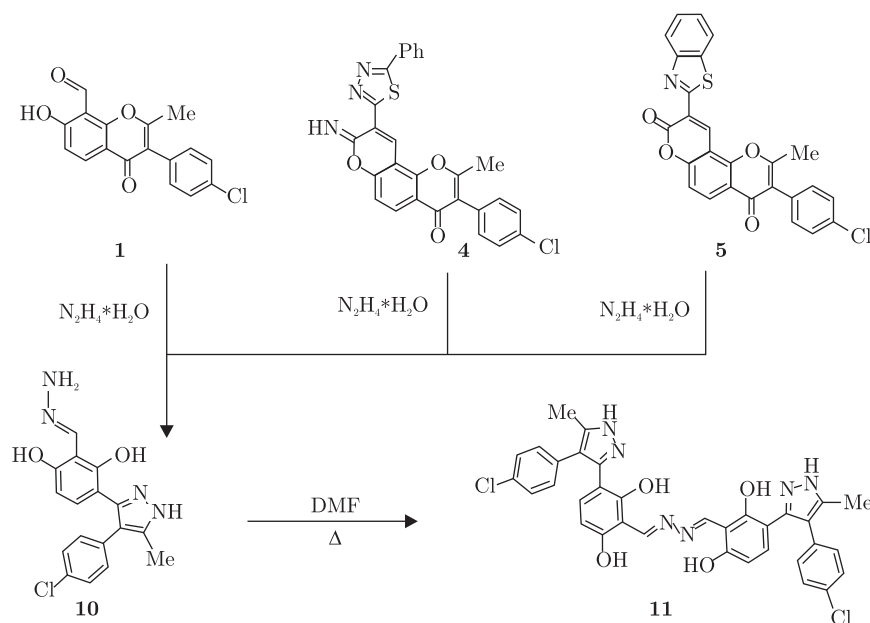
Реакції нуклеофільного приєднання за формільною групою представлені реакціями з нітрогенвмісними нуклеофілами. 7-Гідрокси-8-формілхромони **2** й **3** були введені у реакцію з амоніаком та бензиламіном у спирті з виділенням відповідно альдідмінів **7**, **8**. Оксим **9** ми отримали по реакції 7-гідрокси-8-формілхромону **2** з гідроксиламіном.

Взаємодія 7-гідрокси-8-формілхромонів з гідразинами має деякі особливості. Якщо при реакції формілхромонів **2**, **3** з арилгідразинами були одержані арилгідразони хроменів, то з надлишком гідразин-гідрату реакція не зупиняється на стадії утворення гідразона, а супроводжується рециклізацією γ -піронового кільця з утворенням піразолу [3]:

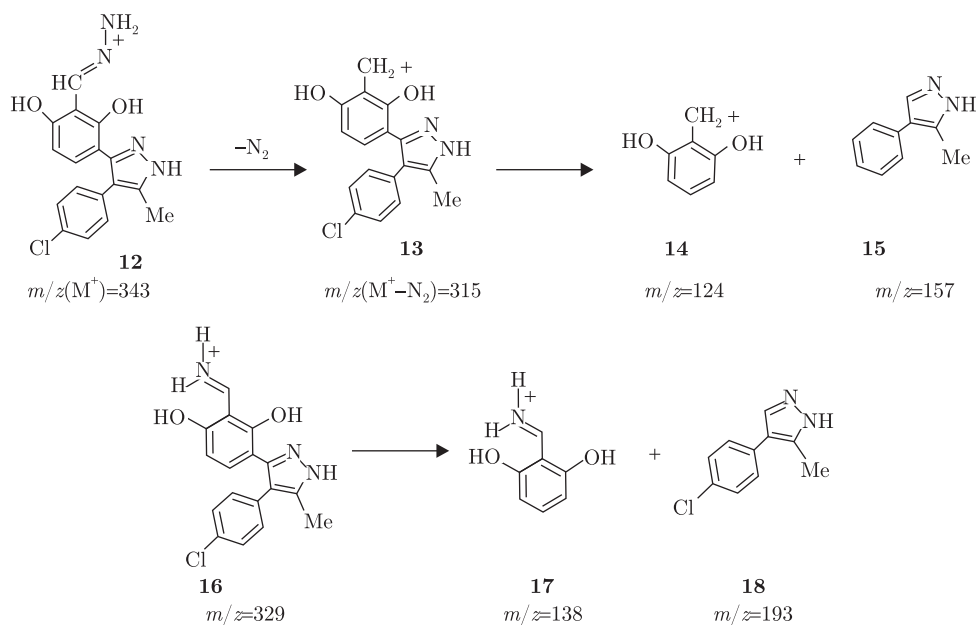


При кип'ятінні 7-гідрокси-8-формілхромону **1** з надлишком гідразин-гідрату в спирті був одержаний піразол **10**, що підтверджується наявністю у спектрі ЯМР ¹H цієї сполуки, записаному у DMSO-d₆, характерного для піразолів уширеного синглета NH-протона при 12,94 м. ч., синглетів двох гідроксильних груп 12,81 м. ч. та 11,85 м. ч., а також двопротонного синглету при 6,64 м. ч. аміногрупи гідрозона і сигналу СН-протона азометинової групи при 8,31 м. ч.

Слід зазначити, що гідрозони нестійкі до нагрівання [8]. При спробі перекристалізувати гідрозон **10** з ДМФА відбувається реакція диспропорціонування з утворенням азіну **11**. Підтвердженням цього слугує спектр ЯМР ¹H сполуки **11**, в якому відсутній синглет аміно-групи при 6,64 м. ч., натомість сигнал СН-протона азометинової групи зміщується відносно відповідного сигналу у вихідній сполуці **10** у слабке поле на 0,86 м. ч. В ІЧ-спектрі гідрозону **10** присутні смуги поглинання, що відповідають аміно-групі при 3424 та 3310 см⁻¹, які не спостерігаються в ІЧ спектрі продукту перекристалізації **11**.



Мас-спектр гідрозону **10** містить пік молекулярного іона M⁺ (*m/z* = 343) **12**, а також піки фрагментарних іонів **13–15**, (*m/z*) відповідно дорівнює 315, 124 та 157.



Різниця в молекулярних масах між іоном **12** та **13** становить 28, що свідчить про те, що це є іон $M^+ - N_2$. Мас-спектр азини **11** не містить піку молекулярного іона при 653,53, але містить сильний пік **16** ($m/z = 329$), що є доказом розриву N–N зв'язку у молекулі азини **11**. Також мас-спектр азини **11** містить піки фрагментарних іонів **17** ($m/z = 138$) та **18** ($m/z = 193$). Отже можна зробити висновки, що структура, яка запропонована для продукту димеризації гідразону **10** відповідає структурі азини **11**.

Поведінку похідних системи 4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-ону в реакціях з гідразин-гідратом було досліджено на прикладі 8-іміно-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-ону **4** та 4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діону **5**, які містять, як γ -піроновий цикл, так і α -(іміно)піроновий цикли.

Відомо, що під дією гідразин-гідрату хромони рециклізуються у піразоли [9]. Літературні дані свідчать, що продукти взаємодії заміщених кумаринів з гідразин-гідратом визначаються будовою кумарину і температурним фактором [10]. Тризаміщені кумарини зазнають атаки гідразин-гідрату, як по другому, так і по четвертому положеннях, що приводить до розкриття лактонного циклу та утворення гідразонів або альдазинів і гідразидів відповідної кислоти [10, 11]. Утворення саліцилальдазину з кумарин-3-карбоксаміду було доведено рентгеноструктурним аналізом [11]. Дані щодо продуктів реакції 2-імінокумаринів з гідразинами є неоднозначними [11].

У нашій роботі 8-іміно-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-он **4** та 4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діон **5** обробляли надлишком гідразин-гідрату при нагріванні протягом 6 год. Спектри 1H ЯМР (записаних у ДМСО- d_6) продуктів, відфільтрованих з реакційних сумішей в обох випадках містять синглет аміно-групи при 6,64 м. ч., уширений синглет NH-протона піразолу при 12,94 м. ч, синглети протонів двох гідроксильних груп при 12,81 м. ч. та 11,85 м. ч., синглет СН-протона при 8,31 м. ч., що дозволяє зробити висновок, що в обох випадках отримано одну і ту ж саму речовину. Після перекристалізації кожної з цих сполук із ДМФА, колір сполук змінився на оранжевий. В спектрах 1H ЯМР продуктів перекристалізації був відсутній синглет аміногрупи, а синглет СН-протона знаходився на 0,86 м. ч. в більш слабкому полі. Спектри ІЧ (ділянка “відбитків пальців”), мас-спектри та 1H ЯМР доводять ідентичність

сирих та перекристалізованих продуктів, отриманих з 8-іміно-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-ону **4** та 4*H*,8*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діону **5**, сполукам **10** й **11**, що були отримані з 7-гідрокси-8-форміл-3-(4-хлорфеніл)хромону **1**.

Таким чином, дослідження показали, що при дії надлишку гідразин-гідрату на 7-гідрокси-8-формілхромони реакція проходить за формільною групою, так і з рециклізацією γ -піронового кільця, а у випадку 8-іміно(оксо)-4*H*-пірано[2,3-*f*]хромен-4-онів відбувається розкриття як α -, так і γ -піронового циклів, з подальшим замиканням піразольного циклу і утворенням гідразону, який при нагріванні димеризується в альдазин.

Експериментальна частина. Контроль за проходженням реакції та чистотою отриманих продуктів здійснювався методом ТПХ на платівках Silufol UV-254. Спектри ^1H ЯМР виміряні на спектрометрі “Varian Mercury 400”, ІЧ-спектри — на приладі “Perkin Elmer BX” в КВг. Мас-спектри було зареєстровано за допомогою приладу “Agilent 1100 LCMSD SL” з хімічною іонізацією (CI).

7-Гідрокси-8-гідроксиметил-2-метил-3-(4-хлорфеніл)хромон (6). До розчину 0,16 г (0,5 ммоль) 7-гідрокси-2-метил-8-форміл-3-(4-хлорфеніл)хромону (**1**) у 20 мл метанолу порціями додають 0,12 г (3 ммоль) борогідриду натрію, залишають на кілька годин. Додають водний розчин хлороводневої кислоти до рН 7. Висаджують осад ефіром і відфільтровують. Вихід 0,15 г (93%).

Безбарвні кристали, т. пл. понад 300 °С. Спектр ^1H ЯМР (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 2,28 (3H, с, 2- CH_3), 4,88 (2H, с, CH_2OH), 6,62 (1H, д, $J = 8,8$, H-6), 7,25 (2H, д, $J = 7,6$, H-2', H-6'), 7,39 (2H, д, $J = 7,6$, H-3', H-5'), 7,67 (1H, д, $J = 8,8$, H-5), 7-ОН, CH_2OH обмінялися з D_2O). ІЧ-спектр (КВг, ν , cm^{-1}): 3349 (ОН), 1634 ($\text{C}=\text{O}_\gamma$).

Знайдено, %: С 64,18; Н 3,99; Cl 10,92. $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{ClO}_4$. Обчислено, %: С 64,47; Н 4,14; Cl 11,19.

7-Гідрокси-8-імінометил-2-метил-3-феноксихромон (7). До розчину 0,3 г (1 ммоль) 7-гідрокси-2-метил-3-фенокси-8-формілхромону (**3**) у 10 мл етанолу додають 1 мл водного амоніаку, залишають на ніч при кімнатній температурі, відфільтровують осад, що випав, перекристалізовують з етанолу. Вихід 0,23 г (78%).

Жовті кристали, т. пл. 253–254 °С (EtOH). Спектр ^1H ЯМР (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 2,36 (3H, с, 2- CH_3), 6,41 (1H, д, $J = 9,6$, H-6), 6,87 (2H, д, $J = 8,0$, H-2', H-6' $_{\text{PhO}}$), 6,99 (1H, т, $J = 7,2$, H-4' $_{\text{PhO}}$), 7,26 (2H, т, $J = 7,2$, H-3', H-5' $_{\text{PhO}}$), 7,69 (1H, т, $J = 9,6$, H-5), 8,78 (1H, д, $J = 13,2$, $\text{CH}=\text{N}$), 10,36 (1H, с, NH), 12,67 (1H, с, 7-ОН). ІЧ-спектр (КВг, ν , $^{-1}$): 3234 (NH), 1645 ($\text{C}=\text{O}_\gamma$).

Знайдено, %: С 69,40; Н 4,43; N 4,58. $\text{C}_{17}\text{H}_{13}\text{NO}_4$. Обчислено, %: С 69,15; Н 4,44; N 4,74.

8-Бензілімінометил-7-гідрокси-3-феноксихромон (8). Отриманий з 0,28 г (1 ммоль) 7-гідрокси-3-фенокси-8-формілхромону (**2**) і 0,16 г (1,5 ммоль) бензиламіну за попередньою методикою. Вихід 0,27 г (73%).

Оранжеві кристали, т. пл. 194–195 °С (EtOH). Спектр ^1H ЯМР (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 4,95 (2H, с, CH_2), 6,57 (1H, д, $J = 9,6$, H-6), 6,93 (2H, д, $J = 7,6$, H-2', H-6' $_{\text{PhO}}$), 7,02 (1H, т, $J = 7,6$, H-4' $_{\text{PhO}}$), 7,28 (2H, т, $J = 7,6$, H-3', H-5' $_{\text{PhO}}$), 7,39 (5H, с, $\text{CH}_2 \text{C}_6\text{H}_5$), 7,81 (1H, д, $J = 9,6$, H-5), 8,39 (1H, с, H-2), 9,09 (1H, с, $\text{CH}=\text{N}$), 14,47 (1H, с, 7-ОН). ІЧ-спектр (КВг, ν , cm^{-1}): 1650 ($\text{C}=\text{O}_\gamma$), 1623 ($\text{C}=\text{N}$).

Знайдено, %: С 74,12; Н 4,84; N 3,95. $\text{C}_{23}\text{H}_{17}\text{NO}_4$. Обчислено, %: С 74,38; Н 4,61; N 3,77.

7-Гідрокси-8-гідроксіімінометил-3-феноксихромон (9). До розчину 0,28 г (1 ммоль) 7-гідрокси-3-фенокси-8-формілхромону (**2**) у 10 мл етанолу додають 0,08 г (1,2 ммоль) гід-

рохлориду гідроксиламіну та залишають при кімнатній температурі на 3 доби. Відфільтровують осад, промивають етанолом. Вихід 0,23 г (77%).

Жовті кристали, т. пл. 236–237 °С (EtOH). Спектр ^1H ЯМР (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 6,95 (2H, д, $J = 8,0$, H-2', H-6'_{PhO}), 7,03 (2H, м, H-6, H-4'_{PhO}), 7,28 (2H, т, $J = 8,8$, H-3', H-5'_{PhO}), 7,95 (1H, д, $J = 8,8$, H-5), 8,49 (1H, с, H-2), 8,67 (1H, с, CH=N), 11,51 (1H, с, 7-OH), 11,89 (1H, с, NOH). ІЧ-спектр (KBr, ν , см^{-1}): 3197 (OH), 1639 (C=O $_{\gamma}$), 1609 (C=N).

Знайдено, %: С 64,41; Н 4,02; N 5,01. $\text{C}_{16}\text{H}_{11}\text{NO}_5$. Обчислено, %: С 64,65; Н 3,73; N 4,71.

2-(Гідразиніліденметил)-4-[4-(4-хлорфеніл)-5-метил-1H-піразол-3-іл]бензен-1,3-діол (10). До розчину 0,32 г (1 ммоль) 7-гідрокси-2-метил-8-форміл-3-(4-хлорфеніл)хромену (1) у 10 мл EtOH додали 0,1 г (3 ммоль) гідразин-гідрату та нагрівали 15 хв до розчинення осаду, охолодили, відфільтрували осад що випав, промили EtOH. Вихід 0,17 г (50%).

Жовті кристали, т. пл. 295 °С (EtOH). Спектр ^1H ЯМР (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 2,21 (3H, с, 5-CH $_3$), 6,09 (1H, д, $J = 8,8$, H-6), 6,64 (2H, с, NH $_2$), 6,69 (1H, д, $J = 8,8$, H-5), 7,20 (2H, д, $J = 7,6$, H-2', H-6'), 7,34 (2H, д, $J = 7,2$, H-3', H-5'), 8,31 (1H, с, CH=N), 11,85 (1H, с, 1-OH), 12,81 (1H, с, 3-OH), 12,94 (1H, с, NH $_{\text{піразол}}$). ІЧ-спектр (KBr, ν , см^{-1}): 3424(NH $_{2\text{ас}}$), 3310 (NH $_{2\text{сим}}$), 1624 (C=N). MS, m/z (%): 343 (M $^+$, 90), 315 (M $^+$ -N $_2$, 10).

Знайдено, %: С 59,31; Н 4,53; Cl 10,44; N 16,47. $\text{C}_{17}\text{H}_{15}\text{ClN}_4\text{O}_2$. Обчислено, %: С 59,57; Н 4,41; Cl 10,34; N 16,34.

2-[2,6-дигідрокси-3-(4-(4-хлорфеніл)-5-метил-1H-піразол-3-іл)бензил]-іденгідразиніліденметил-4-(4-хлорфеніл)-5-метил-1H-піразол-3-іл]бензен-1,3-діол (11). Метод А. 0,34 г (1 ммоль) 2-(гідразиніліденметил)-4-[4-(4-хлорфеніл)-5-метил-1H-піразол-3-іл]бензен-1,3-діолу (10) розчиняють при нагріванні у 2–3 мл диметилформаміду, при цьому, спочатку спостерігається повне розчинення, а потім з гарячого розчину випадає осад, який відфільтровують та промивають метанолом. Вихід 0,58 г (89%).

Метод Б. До суспензії 1 ммоль 4H,8H-пірано[2,3- f]хромен-4-ону (4) або 4H,8H-пірано[2,3- f]хромен-4,8-діону (5) у 5 мл EtOH додають 0,32 г (10 ммоль) гідразин-гідрату, упарюють розчинник, залишок перекристалізують з ДМФА. Вихід 0,5 г (77) з 4, 0,51 г (78) з 5.

Оранжеві кристали, т. пл. понад 300 °С. MS, m/z (%): 329 (M $^+$ /2, 99). Спектр ЯМР ^1H (400 МГц, ДМСО- d_6 , δ , м. ч., $J/\text{Гц}$): 2,23 (6H, с, 5-CH $_3$), 6,24 (2H, уш. с, H-6), 6,96 (2H, д, $J = 8,0$, H-5), 7,23 (4H, д, $J = 7,2$, H-2', H-6'), 7,38 (2H, д, $J = 7,2$, H-3', H-5'), 9,17 (2H, с, HC=N), 11,61 (2H, с, 1-OH), 12,26 (2H, с, 3-OH), 13,00 (1H, с, NH $_{\text{піразол}}$). ІЧ-спектр (KBr, ν , см^{-1}): 3442 (NH), 3066 (OH), 1625 (C=N–N=C).

Знайдено, %: С 62,72; Н 4,01; Cl 10,93; N 12,77. $\text{C}_{34}\text{H}_{26}\text{Cl}_2\text{N}_6\text{O}_4$. Обчислено, %: С 62,49; Н 4,01; Cl 10,85; N 12,86.

1. Шокол Т. В., Туров В. А., Семенюченко В. В., Хилія В. П. Азагетероциклические производные α -пирано[2,3- f]изофлавонов // Химия природ. соединений. – 2006. – № 6. – С. 544–547.
2. Lozinski O. A., Shokol T. V., Khilya V. P. 4H,8H-Pyrano[2,3- f]chromone-4,8-diones as versatile precursors for the synthesis of 6-(1,2-oxazole-5-yl)-2H-chromone-2-ones // Monatsh. Chem. – 2013. – **144**, No 2. – P. 217–222.
3. Шокол Т. В., Лозинский О. А., Туров А. В., Хилія В. П. 7-Гидрокси-3-фенокси-8-формилхромоны – аналоги природных флавоноидов // Химия природ. соединений. – 2009. – № 3. – С. 298–302.
4. Шокол Т. В., Лозинский О. А., Туров А. В., Хилія В. П. Синтез 9-азолил-3-(4-фенил-4H-1,2,4-триазол-3-ил)-4H,8H-пирано[2,3- f]хромен-4,8-дионов // Химия гетероцикл. соединений. – 2009. – № 9. – С. 1361–1367.
5. Шокол Т. В., Лозинский О. А., Ткачук Т. М., Воловченко Т. А., Хилія В. П. Фурильные аналоги α -пирано[2,3- f]изофлавонов с азольным заместителем в α -пирановом ядре // Там же. – 2010. – № 6. – С. 843–848.

6. Шокол Т. В., Горбуленко Н. В., Хиля В. П. 9-Азагетарил-3-(ізоксазол-3-іл)пірано[2,3-*f*]хромен-4,8-діони // Доп. НАН України. – 2010. – № 7. – С. 142–145.
7. Da Re P., Verlicchi L., Setnikar I. Mannich reaction on 7-hydroxychromones and flavones. Synthesis of powerful central nervous system stimulants // J. Organ. Chem. – 1960. – 25. – P. 1097–1100.
8. *Общая органическая химия* / Под ред. Д. Бартона и У. Д. Оллиса. Т. 3. Азотсодержащие соединения / Под ред. И. О. Сазерленда // Москва: Химия, 1982. – С. 560–561.
9. Хиля В. П., Купчевская И. П., Гришко Л. Г. Взаимодействие модифицированных изофлавонов с гидразином и его производными // Химия и биологическая активность синтетических и природных соединений // Азот. гетероциклы и алкалоиды. – 2001. – 1. – С. 147–155.
10. Vognar R., Bruckner V., Szantay Cs. Recent flavonoid research. Recent developments in the chemistry of natural carbon compounds. Vol. V. – Budapest: Acad. Kiado, Publ. House Hungarian acad. Sci., 1973. – P. 20–21.
11. Борисов А. В., Русанова С. В., Коваленко С. Н., Власов С. В. Взаимодействие 3-замещенных кумаринов и их 2-иминоаналогов с производными гидразина // Журн. орган. та фарм. хімії. – 2007. – 5, вип. 2(18). – С. 71–75.

Київський національний університет
ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 28.02.2013

О. А. Лозинский, Т. В. Шокол, член-корреспондент НАН Украины В. П. Хиля
Взаимодействие 7-гидрокси-8-формилхромонов
с 8-имино(оксо)-4*H*-пирано [2,3-*f*]хромен-4-онов с нуклеофилами

*При обработке 7-гидрокси-8-формилхромонов боргидридом натрия, аммиаком, аминами и гидросиламином реакция протекает исключительно по формильной группе, в отличие от этого, с избытком гидразин-гидрата происходит нуклеофильное присоединение молекулы гидразина по формильной группе и рециклизация γ -пиронового кольца в пиразольное. При нагревании гидразон димеризуется в альдазин. При действии гидразин-гидрата на 8-имино(оксо)-4*H*-пирано [2,3-*f*]хромен-4-оны происходит раскрытие как α -, так и γ -пиронового циклов, выделяются те же самые гидразон и альдазин, что и в случае 7-гидрокси-8-формилхромонов.*

O. O. Lozinski, T. V. Shokol,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **V. P. Khilya**

Reaction of 7-hydroxy-8-formylchromones and
8-imino(oxo)-4*H*-pyrano [2,3-*f*]chromen-4-ones with nucleophiles

*Treatment of 7-hydroxy-8-formylchromones with sodium borohydride, ammonia, amines, and hydroxylamine hydrochloride proceeds exclusively at a formyl-group, while, in the presence of the excess of hydrazine-hydrate, appropriate 7-hydroxy-8-formylchromone underwent both the transformation of the γ -pyrone cycle into pyrazole and the reaction of nucleophilic addition to a formyl-group. The heating of hydrazone results in its dimerization into aldazine. The interaction of 8-imino(oxo)-4*H*-pyrano [2,3-*f*]chromen-4-ones with hydrazine-hydrate leads to the opening of α - and γ -pyrone cycles and to the separation of hydrazone and aldazine like the case with 7-hydroxy-8-formylchromone.*



УДК 577.24:577.2.043

А. Н. Берестяная

Влияние острого рентгеновского облучения на эпигеном в ходе онтогенеза *Linum usitatissimum*

(Представлено академиком НАН Украины Д. М. Гродзинским)

*Исследованы изменения эпигенома в онтогенезе *Linum usitatissimum*, подверженного действию разных доз острого рентгеновского облучения. Статус метилирования определен методом метилчувствительной полимеразной цепной реакции. Обнаружена зависимость повышения уровня метилирования от дозы облучения, установлены эпигенетические изменения в процессе старения листьев *Linum usitatissimum*.*

Старение как запрограммированный процесс возрастания деградационных изменений организма в ходе онтогенеза обусловлено комплексным взаимодействием генетического аппарата и повреждающих факторов различной природы. Связующим звеном в данном взаимодействии выступает эпигеном, как динамическая система контроля экспрессии генов. Она может как ослаблять, так и усиливать действие повреждающих факторов на геном и выступать в роли регулятора реализации генетической программы возрастной деградации. В процессе старения снижается общий уровень метилирования генома, параллельно ослабляются механизмы репарации, увеличивается число мутаций и хромосомных аномалий, осуществляется экспрессия ряда гидролитических ферментов, все это усиливает негативное действие таких повреждающих факторов, как радиация. Известно, что рентгеновская радиация индуцирует изменения в эпигеноме растений. Биологическая эффективность данного вида радиации во многих случаях выше эффективности других видов радиоактивных излучений и химических мутагенов [1, 2].

На сегодня является актуальным выяснение эпигенетической компоненты в механизмах регуляции старения, обусловленного реализацией генетической программы и действием повреждающих факторов. Исходя из этого, целью исследования было установление влияния радиационного облучения на эпигеном в ходе старения вегетативных органов растения *Linum usitatissimum*.

Материалы и методы. Семена *L. usitatissimum* подвергали воздействию острого рентгеновского облучения в четырех дозах: 10, 20, 50 и 100 Гр. В качестве источника излучения

использовали рентгеновский аппарат “РУМ-17”. Растения выращивали в условиях вегетационного опыта. Объектом исследования была ДНК семядольных листьев.

Геномную ДНК семядольных листьев *L. usitatissimum* выделяли модифицированным СТАБ-методом, очищали путем фенольной экстракции, осаждали этанолом, растворяли в ТЕ-буфере (10 мМ *tris*-HCl, pH 8,0; 1 мМ ЭДТА), концентрацию доводили до 0,2 мкг/мкл [3, 4]. Исследовали эпигеном методом метилчувствительной полимеразной цепной реакции (МЧ-ПЦР). В основе метода МЧ-ПЦР лежит принцип взаимодействия метилчувствительных рестриктаз со специфическими сайтами узнавания ДНК [5, 6]. Каждый из образцов ДНК в количестве 1 мкг подвергали гидролизу в 20 мкл реакционной смеси, содержащей 10 ед. акт. метилчувствительной рестриктазы HpaII в реакционном буфере, рекомендованном производителем, при 37 °С в течение 2 ч. Аналогично рестрикцию осуществляли с рестриктазой SmaI. По окончании инкубации 1 мкл каждой реакционной смеси использовали для последующей амплификации с соответствующими праймерами. Для тотального скрининга статуса метилирования CG-динуклеотидов в геноме использовали CG-богатые праймеры. Метилирование регуляторного фрагмента гена *rrn5*, продуктом которого является 5S рРНК, определяли методом специфической МЧ-ПЦР с праймерами, фланкирующими сайт узнавания фермента в исследуемом участке ДНК. Дизайн праймеров, использованных в работе, был выполнен с помощью программ Primer3 (v.0.4.0) на основании нуклеотидных последовательностей, зарегистрированных в GenBank (табл. 1). Контролем полноты прохождения гидролитической реакции служила ПЦР рестриктов, полученных при идентичных условиях после гидролиза эндонуклеазой рестрикции MspI, не чувствительной к метилированию цитозинов. Амплификацию проводили в 25 мкл реакционной смеси на приборе “Терцик” (“ДНК-Технология”, Россия) с использованием набора для ПЦР (“МВИ Fermentas”). Условия термоциклирования были оптимизированы для каждого из амплифицируемых фрагментов.

ПЦР-продукты разделяли электрофорезом в 1,7% агарозном геле (“Sigma”, США). В лунку геля наносили по 10 мкл ПЦР-смеси. Для электрофореза применяли 0,5xTBE-буфер (0,09 Трис, 0,09 М борной кислоты, 2 мМ ЭДТА, pH 8,0). Продукты реакции в геле визуализировали с помощью трансиллюминатора Vilber Lourmat ECX-15M (Франция) с длиной волны 312 нм, фотографировали в УФ-свете фотокамерой Sony DSC-W320.

Результаты и обсуждения. Метод МЧ-ПЦР позволяет анализировать статус метилирования как отдельных фрагментов генов, так и проводить тотальный скрининг дифференциально метилированных CG-динуклеотидов в геноме. На первом этапе МЧ-ПЦР происходит гидролиз ДНК метилчувствительными рестриктазами, на втором — амплификация исследуемых участков путем ПЦР. Присутствие метилированного цитозина в сайте узнавания метилчувствительной рестриктазы блокирует ферментативную реакцию, расщепления по сайту не происходит, следовательно, дальнейшая ПЦР с праймеров, соответст-

Таблица 1. Структура праймеров, использованных в МЧ-ПЦР

| Праймеры | Структура праймеров |
|-----------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| К регуляторному фрагменту гена <i>rrn5</i> | 5'-GCA TGA AGA CGA AGG CGG CC-3' 5'-ACG AGG ACT TCC CAC GCC GG-3' |
| Для тотального скрининга CG-богатых участков генома | 5'-AAC CCT CAC CCT AAC CGC GG-3' 5'-AAC CCT CAC CCT AAC CCG CG-3' 5'-GCA CCT GGG TTG ATG GCC GG-3' 5'-TTA GGG AAT AGT GGT CGG CC-3' |

вующих участкам ДНК, вокруг сайта узнавания амплифицирует те фрагменты, в которых есть метилированный цитозин. Если в исследуемом сайте неметилирован цитозин, то метилчувствительная рестриктаза расщепляет его и при последующей ПЦР не образуются продукты амплификации [7, 8]. С помощью метода МЧ-ПЦР мы провели полногеномный анализ CG-участков, а также скрининг метилирования сайтов метилчувствительных рестриктаз HpaII и SmaI в регуляторном участке гена *rrn5* с целью обнаружения изменений эпигенетического статуса под действием облучения в ходе онтогенеза *L. usitatissimum* [9].

Полногеномный анализ CG-участков и отдельного гена позволяет определить статус метилирования в динамике и проследить характер его изменения. Так как задачей исследования было определение эпигенетических изменений в образцах, облученных дозами ионизирующего облучения в ходе онтогенеза, мы строили исследование таким образом, чтобы фиксировать параметры на разных стадиях. Стадии онтогенеза семядольных листьев условно обозначили как: С1, С2, С3, С4, каждая из которых соответствует этапам морфологически и биохимически значимых изменений.

В ходе тотального скрининга CG-богатых участков генома методом МЧ-ПЦР мы установили наличие дозовой зависимости. С увеличением дозы облучения возникали дополнительные продукты реакции, что указывало на появление новых сайтов метилирования под действием облучения острой рентгеновской радиацией (рис. 1, а).

Наличие дополнительных ампликонов в облученных образцах свидетельствует о том, что радиация спровоцировала метилирование сайта метилчувствительной рестриктазы HpaII. Для рестриктазы SmaI картина была аналогичной. Именно данные продукты ПЦР и представляют главный предмет наших поисков. Вероятно, гиперметилированные HpaII-сайты могут выступать в роли эпигенетических маркеров радиационного облучения. Исследование метилирования фрагмента гена *rrn5* также показало наличие дозозависимых изменений, выраженных в появлении дополнительных сайтов метилирования в облученных образцах (см. рис. 1, б).

В процессе старения листьев *L. usitatissimum* наблюдалось снижение уровня метилирования CG-динуклеотидов генома, а также изменение статуса метилирования во фрагменте гена *rrn5* в облученных образцах (см. рис. 1, в, г). Статус метилирования фрагмента гена *rrn5* изменился в сторону уменьшения модифицированных сайтов. Та картина дозовой зависимости повышения уровня метилирования, которая наблюдалась на начальной стадии онтогенеза (см. рис. 1, а, б), нивелировалась в процессе перехода к поздним стадиям онтогенеза.

Скрининг сайтов метилирования с помощью МЧ-ПЦР показал дозозависимое увеличение метилированных последовательностей преимущественно на начальных стадиях онтогенеза, однако на более поздних этапах запускаются процессы возрастного гипометилирования CG-динуклеотидов и в опытных образцах наблюдается картина значительного уменьшения метилированных HpaII-сайтов. Реакция с ферментом MspI не позволила выявить различия в профиле метилирования ДНК на разных стадиях онтогенеза по сайтам узнавания этой рестриктазы в контролях и облученных вариантах, так как с продуктами гидролиза этой рестриктазы, расщепляющей метилированные и неметилированные последовательности, не происходит амплификации в ходе МЧ-ПЦР.

Живые организмы постоянно находятся под воздействием ионизирующего излучения из природных источников. Растения, в отличие от животных, обладают большей устойчивостью к ионизирующей радиации. Тем не менее за счет того, что энергия заряженных частиц значительно превышает энергию внутримолекулярных связей, ионизирующее излу-

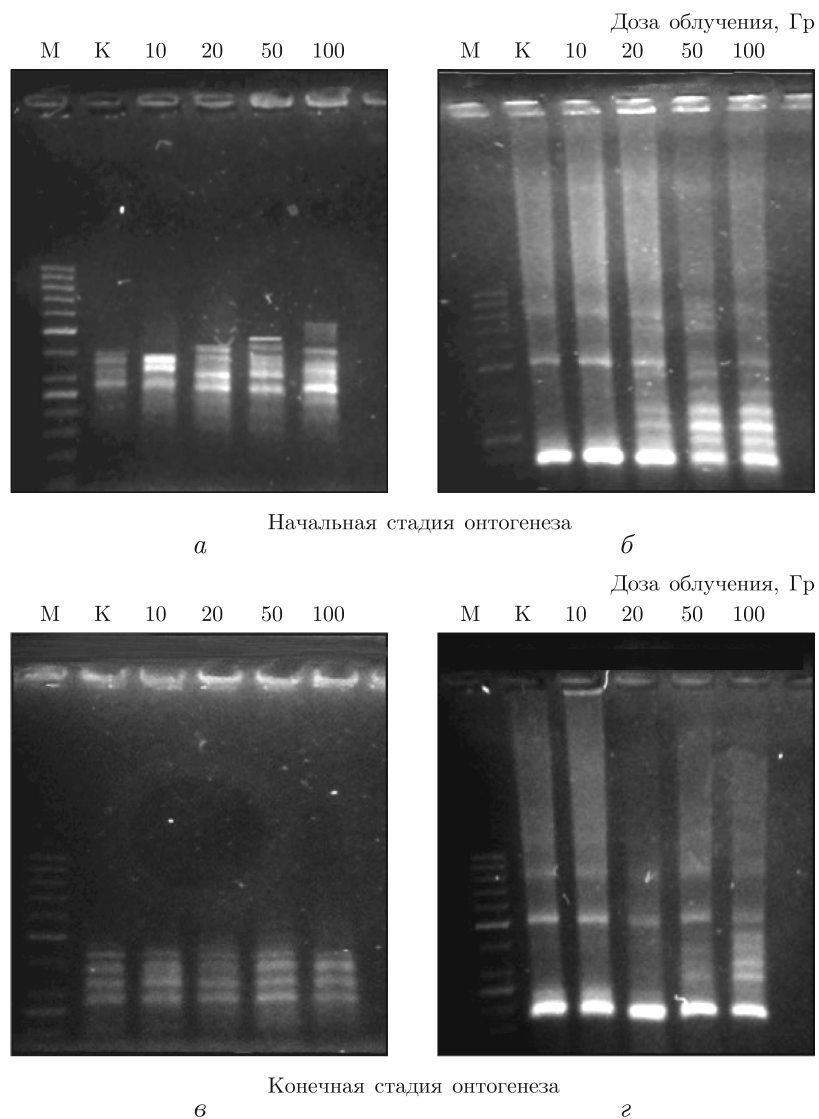


Рис. 1. Результаты скрининга CG-участков генома (а, в) и фрагмента гена *mtn5* (б, г) путем МЧ-ПЦР в образцах, облученных разными дозами рентгеновской радиации

чение способно проникать внутрь объекта и вызывать изменения его структур, повреждать химические связи молекул, входящих в состав клеток, нарушать клеточные структуры, процессы обмена веществ и физиологические функции целостного организма. Все это, в свою очередь, способствует активации деградиционных механизмов, сопровождающих старение [10].

Радиация может вызывать гипо- и гиперметилирование сайт-специфических участков ДНК, что отражается на работе генов. Эпигеномные эффекты напрямую зависят от доз, видов и способов облучения и специфики объектов, подвергшихся воздействию [11]. Так, например, повышение уровня радиации вызывает у *Arabidopsis* и у других монокарпических растений увеличение тотального метилирования генома и гетерохроматиновых гистонов, что может рассматриваться как реакция стрессоустойчивости, необходимая для адаптации растений. Происходит это за счет активации процесса *de novo* метилирования ДНК,

обусловленного ответной реакцией на рост стресс-индуцированной транспозонной активности [12]. Существует гипотеза, что метилирование обеспечивает стабилизацию генома, поддерживая его постоянство в изменяющихся условиях. Это подтверждается тем, что искусственное снижение метилирования ДНК вызывает повышение уровня транспозонной активности и хромосомных перестроек. Под действием абиотического стресса также может происходить деацетилирование гистонов и деметилирование сайт-специфических последовательностей, что ведет к тотальному гипометилированию, сопряженному с ростом геномной нестабильности [13].

Обнаруженное в нашем опыте дозозависимое повышение уровня метилирования под действием рентгеновского облучения может быть обусловлено транспозонной активацией, вызывающей дополнительное метилирование. Вместе с тем картина возрастного снижения числа модифицированных сайтов облученных образцов объясняется процессами гипометилирования, происходящими в геноме стареющих клеток.

Существует предположение, что снижение уровня метилирования с возрастом является общебиологическим процессом, присущим как животным, так и некоторым монокарпическим растениям, у которых можно наблюдать в динамике четкую картину возрастной деградации. Множество экспериментов свидетельствуют о том, что старение животных клеток и уменьшение метилирования являются взаимосвязанными процессами [14]. Однако результаты опытов, проведенных на растительных организмах, не столь однозначны касательно возрастного падения уровня метилирования суммарной ДНК и отдельных функциональных последовательностей. На примере некоторых генов наблюдается обратный возрастному гипометилированию эффект. В процессе старения происходит переменное метилирование цитозина в палиндромах, наблюдается как понижение и повышение, так и поддержание стабильного уровня метилирования в зависимости от специфики изучаемых последовательностей [15]. Тем не менее изучение возрастной динамики метилирования ДНК может служить биологическим маркером определения темпов старения организма.

Метилирование ДНК растений варьирует в ходе онтогенеза, с момента прорастания семян до терминальных стадий развития, как отдельных органов, так и целостного растительного организма. Существуют четкие возрастные изменения паттернов метилирования ДНК у растений. Переход к каждой новой стадии онтогенеза характеризуется изменением эпигенетического статуса, обеспечивающего активацию или репрессию специфического набора генов. Одни гены метилируются по мере старения организма, другие, напротив, теряют метилированные сайты, вследствие деметилирования или вырезания модифицированных участков. При старении происходят изменения метилирования CpG-динуклеотидов. Образование неактивных участков хроматина приводит к инактивации генов в процессе старения [12].

Гипометилирование осуществляется путем уменьшения активности поддерживающих ДНК-метиلاз либо посредством ферментативного удаления метильных групп из ДНК. Последнее играет важную роль в реакциях поддержания эпигеномной пластичности в условиях действия стрессовых факторов. Происходящая в результате деметилирования активация генов супрессорных белков приводит к подавлению гена ДНК-метилазы. Таким образом, возрастное деметилирование запускает каскад реакций дополнительного деметилирования [11]. С возрастом падает метилирование промоторов регуляторных генов, таких как группы SAG (senescence associated genes), в результате чего происходит активация этих генов, ведущая к репрессии клеточных функций.

Вариабельная експрессия генов в онтогенезе растений обусловлена как генетическими, так и эпигенетическими процессами. Стрессовые факторы окружающей среды посредством эпигенома оказывают влияние на реализацию генетических программ растений [14].

В эксперименте получены данные, свидетельствующие о различии профилей метилирования ДНК семядольных листьев *L. usitatissimum* по сайтам узнавания метилчувствительных рестриктаз HpaII и SmaI на начальной и конечной стадиях онтогенеза. В конце онтогенеза листьев наблюдалось более низкое содержание сайтов узнавания этих эндонуклеаз, чем в начале. Воздействие нескольких доз острого рентгеновского облучения вызвало процессы дополнительного метилирования, т. е. повышение числа сайтов узнавания метилчувствительных рестриктаз в органе облученного растения. Это свидетельствует о способности эпигенома изменяться под действием повреждающих факторов внешней среды. Возрастное снижение числа модифицированных HpaII-сайтов во всех образцах объясняется процессами гипометилирования, происходящими в геноме стареющих клеток. Эпигеномный эффект, вызванный облучением на ранней стадии онтогенеза листа, в процессе старения нивелировался под влиянием внутренних деградационных процессов. Хотя особенности изменения эпигенома в процессе старения тканей и органов *L. usitatissimum* еще не выяснены полностью, анализ дифференциального метилирования ДНК на разных стадиях онтогенеза растения под влиянием такого стрессового фактора, как радиация, может привести к более полному пониманию механизмов регуляции старения и поможет определить, какая из компонент — средовая или генетическая — вносит больший вклад в процессы возрастной деградации.

1. Берестяна А. М., Гродзинський Д. М. Роль мутагенних факторів в процесі старіння живих організмів // Наук. вісн. Ужгород. ун-ту. Серія Біологія. – 2011. – № 30. – С. 118–127.
2. Галицкий В. А. Эпигенетическая природа старения // Цитология. – 2009. – 51, № 5. – С. 388–397.
3. Остроумов Л. А., Просеков А. Ю., Мудрикова О. В. Метод выделения растительной ДНК из растений и продуктов питания на их основе // Изв. Самар. науч. центра РАН. – 2010. – 12, № 4. – С. 722–724.
4. Azmi K., Schonian G., Abdeen Z. Methods incorporating a polymerase chain reaction and restriction fragment length polymorphism and their use as a gold standard in diagnosing Old World cutaneous leishmaniasis // Diagn. Microbiol. Infect. Dis. – 2011. – 71, No 2. – P. 151–155.
5. Benhattar J., Clement G. Methylation-sensitive. Single-strand conformation analysis: a rapid method to screen for and analyze DNA methylation. Methods // Mol.-Biol. – 2004. – 287. – P. 181–193.
6. Keyte A. L., Percifield R., Liu B. et al. Intraspecific DNA Methylation Polymorphism in Cotton (*Gossypium hirsutum* L.) // J. Heredity. – 2006. – 97, No 5. – P. 444–450.
7. Guo W. L., Wu R., Zhang Y. F. et al. Tissue culture-induced locus-specific alteration in DNA methylation and its correlation with genetic variation in *Codonopsis lanceolata* Benth. et Hook. f // Plant Cell Rep. – 2007. – 26, No 8. – P. 1297–1307.
8. Кузнецова Е. Б., Стрельников В. В. Методы анализа метилирования ДНК // Мед. генетика. – 2006. – 11. – С. 3–11.
9. Берестяна А. М., Гродзинський Д. М., Крипка Г. В. Вікові зміни метилування ДНК сім'ядольних листків *Linum usitatissimum* за умови УФ-В опромінення // Доп. НАН України. – 2011. – № 7. – С. 143–147.
10. Косаковская И. В. Стрессовые белки растений. – Киев: Вид-во фітосоціол. центру, 2008. – 154 с.
11. Viswanathan C., Zhu J. RNA-directed DNA methylation and demethylation in plants // Sci. China. Ser. C: Life Sci. – 2009. – 52, No 4. – P. 331–343.
12. Kalisz S., Purugganan M. Epialleles via DNA methylation: consequences for plant evolution // Trends Ecol. and Evolut. – 2004. – 19. – P. 309–314.
13. Kapazoglou A., Tsiftaris A. Epigenetic Chromatin Regulators as Mediators of Abiotic Stress Responses in Cereals // Agricultural and Biological Sciences. Abiotic Stress in Plants – Mechanisms and Adaptations. – 2011. – Ch. 17. – P. 395–414.
14. Vanyushin B. F., Ashapkin V. V. DNA Methylation in Plants. – New York: Nova Science, 2011. – 152 p.

15. Brown J. C., Decker M. M., Fieldes M. A. A comparative analysis of developmental profiles for DNA methylation in 5-azacytidine-induced early-flowering flax lines and their control // Plant Sci. – 2008. – 175. – P. 217–225.

Институт клеточной биологии и генетической инженерии НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 21.02.2013

А. М. Берестяна

Вплив гострого рентгенівського опромінення на епігеном у ході онтогенезу *Linum usitatissimum*

*Досліджено зміни епігеному в онтогенезі *Linum usitatissimum*, що зазнав дії різних доз гострого рентгенівського опромінення. Статус метилування визначено методом метилчутливої полімеразної ланцюгової реакції. Виявлено залежність підвищення рівня метилування від дози опромінення, встановлено епігенетичні зміни в процесі старіння листків *Linum usitatissimum*.*

A. N. Berestyanyaya

Effects of hard X-ray radiation on the epigenome during ontogenesis of *Linum usitatissimum*

*The ontogenesis changes of the epigenome of *Linum usitatissimum* are investigated. This object was subjected to the action of different irradiation doses. Methylation status was determined by methylsensitive PCR. The study found the increasing dependence on the dose of methylation, and the epigenetic changes during the aging leaves of *Linum usitatissimum* are established.*

В. В. Сарнацкая

Взаимодействие функционализированных олеиновой кислотой и полиэтиленгликолем наночастиц Fe_3O_4 с альбумином

(Представлено академиком НАН Украины В. Ф. Чехуном)

Изучение взаимодействия наночастиц магнетита Fe_3O_4 с человеческим сывороточным альбумином (ЧСА) показало, что молекула белка оказывает стабилизирующее действие на наночастицы магнетита Fe_3O_4 , предохраняя их от агрегирования в водной среде. Установлено, что функционализированные олеиновой кислотой и ПЭГ наночастицы Fe_3O_4 обладают высоким сродством к альбуминовой молекуле ($K_{\text{асс}} \geq 10^5$ /моль). При взаимодействии магнетита с ЧСА происходят конформационные переходы белковой молекулы, затрагивающие область связывания, расположенную во втором ПА домене, которая совпадает с первым I лекарственным центром (Site I) связывания альбуминовой молекулы. Информация о локализации центров ассоциации и конформационных переходах, возникающих при взаимодействии наночастиц Fe_3O_4 с ЧСА, позволит определить их оптимальное молярное соотношение, обеспечивающее стабилизацию наночастиц в жидкой фазе и максимально сохраняющее транспортную емкость самого альбумина в отношении противоопухолевых препаратов, что является актуальным при разработке векторной лекарственной терапии онкологических больных.

Определение возможных сайтов связывания наночастиц на молекуле белка является важнейшей задачей как при изучении их токсичности, так и при разработке, создании и внедрении функциональных и безопасных нанобиогибридных материалов. Слой адсорбированных белков на поверхности частиц, проникающих в биологические системы, сохраняет биоотпечаток самого наноматериала и оказывает влияние на его поглощение, распределение и выведение из организма [1]. Сам процесс адсорбции протеинов вызывает изменение их нативной конформации и функции, что, в свою очередь, может привести к возникновению нежелательных побочных эффектов. Поэтому, зная локализацию мест связывания наночастиц на молекуле белка, можно прогнозировать вероятные биологические последствия и тем самым предотвращать их потенциальную токсичность.

В настоящее время нанобиогибридные системы, основанные на взаимодействии белков с наноматериалами, специально разрабатываются для производства различных зондов, предназначенных для биомедицинской визуализации и сепарации, а также для таргетной доставки лекарственных препаратов [2–4]. Поэтому процесс взаимодействия наноматериалов с белками сыворотки или плазмы крови должен быть стратегически контролируемым для предотвращения негативных последствий каких-либо вмешательств в функциональную систему протеинов, а также способствовать эффективному переносу и естественному распознаванию транспортируемых лекарственных препаратов клетками и тканями организма. Следовательно, тактика соединения наноматериалов с белками требует глубоких знаний о соотношении свойств конкретного наноматериала и связывающего его эпитопа.

Альбумин является основным транспортным белком, на долю которого приходится более 50% всех протеинов плазмы крови. Кристаллическая структура альбумина, по форме напоминающая сердце, имеет размер $80 \times 80 \times 30 \text{ \AA}$. В водных растворах молекула белка принимает форму сигары размером $40 \times 140 \text{ \AA}$. Альбумин способен связывать разные по химической природе наночастицы включая частицы магнетита, которые в настоящее время имеют большой потенциал в области биомедицинского использования [5]. Исследования, касающиеся связывания наночастиц Fe_3O_4 размером $8,02 \pm 1,26 \text{ нм}$ с человеческим сывороточным альбумином (ЧСА), базируются на информации о ЧСА как об основном транспортере метаболитов и токсинов эндо- и экзогенной природы, в том числе ксенобиотиков, проникающих через мембранные структуры клеток [6, 7].

Характеристика интерфейса комплекса магнетит–альбумин является важным аспектом в конструировании биопереносчиков для таргетной доставки лекарственных препаратов. Исследования показывают, что структура и функции ЧСА зависят от размера комплексируемых с ним наночастиц, их химического состава, а также локализации связывающего сайта на белке и природы самой связи (ковалентная или нековалентная). Весьма актуальной является информация о константах ассоциации и стехиометрии различных комбинаций белков плазмы крови, в том числе и альбумина, с наночастицами Fe_3O_4 , а также сведения о рейтинге тропности этих белков к магнетиту. Биологические эффекты взаимодействия наночастиц с клеточными рецепторами разнятся в зависимости от относительных скоростей обмена протеинов. Скорость ассоциации и диссоциации может существенно варьировать в зависимости от природы той или иной наночастицы и белковой молекулы. Константа скорости ассоциации представляет собой определенную диффузионно-контролируемую величину, однако конформационные изменения, вызванные взаимодействием протеина с наночастицей, могут снижать ее на несколько порядков. Прочно связанный белок, медленно обменивающийся с другими в комплексе со связанной наночастицей, может участвовать в эндоцитозе, переходя из экстрацеллюлярного пространства в интрацеллюлярное, в то время как слабо связанный или быстро обменивающийся протеин во время переноса может быть вытеснен из комплекса другим внутриклеточным белком. Оценка уровня ассоциации и диссоциации белков и наночастиц, определение временных рамок процессов обмена связанных протеинов со свободными, изучение взаимодействия комплексов белок–наночастица с соответствующими рецепторами и их последующие биологические эффекты являются важной фундаментальной задачей.

Таким образом, изучение специфики взаимодействия функционализированных наночастиц магнетита Fe_3O_4 с лекарственными центрами связывания альбумина позволяет предсказать характер клеточной интернализации полученных комплексов и их дальнейшее биораспределение в организме. Понимание механизма образования комплексов белок–магнетит открывает реальные перспективы их дальнейшего использования в процедурах гипертермии и таргетной лекарственной терапии онкологических больных.

Нами методом дифференциальной сканирующей микрокалориметрии оценивалось комплексообразование наночастиц Fe_3O_4 с молекулами сывороточного альбумина.

Материалы и методы. В работе были использованы: V фракция обезжиренного человеческого сывороточного альбумина, варфарин, диазепам (“Sigma”, США), магнитная жидкость наночастиц Fe_3O_4 (Институт химии поверхности НАН Украины, Киев).

Для термодинамической оценки структурных переходов альбуминовой молекулы при взаимодействии с наночастицами магнетита Fe_3O_4 образцы исходного и нагруженного белка были подвергнуты процессу плавления на приборе ДАСМ-4 (Пушино, Россия) при ско-

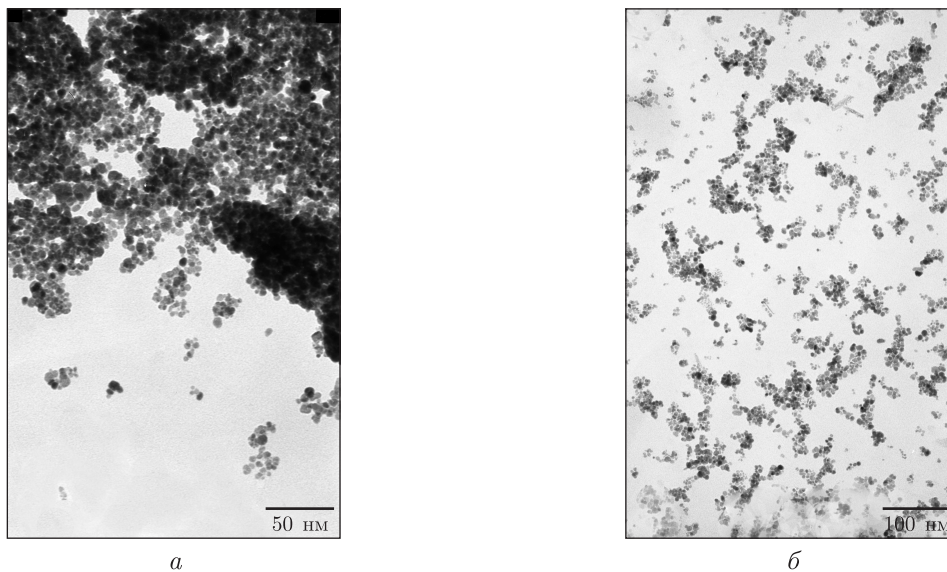


Рис. 1. Трансмиссионная электронная микроскопия: иллюстрация нативных наночастиц Fe_3O_4 до их модификации олеиновой кислотой и ПЭГ (*a*) и наночастиц Fe_3O_4 , стабилизированных ЧСА (*б*)

рости нагрева $1\text{ }^\circ\text{C}/\text{мин}$. Данные кривых плавления были применены для расчета термодинамических параметров тепловой денатурации, а именно: температуры плавления ($T_{\text{пл}}$) и энтальпии плавления ($\Delta H_{\text{пл}}$).

Результаты и обсуждение. Благодаря монодисперсности по размерам, форме и составу, магнитные наночастицы Fe_3O_4 являются идеальным объектом для биомедицинского применения. При диаметре остова менее 20 нм и гидродинамическом диаметре <50 нм эти частицы имеют размер, сопоставимый с ядерными пораами (~ 50 нм) и значительно меньший, чем размер клеток (обычно 10–100 нм) [8]. Исходно синтезированные наночастицы Fe_3O_4 имеют тенденцию к образованию больших агрегатов (рис. 1, *a*) из-за сильного магнитного диполь-дипольного взаимодействия, поэтому для улучшения их стабильности и биосовместимости частицы магнетита покрывают сурфактантами или полимерами, например олеиновой кислотой, хитозаном или полиэтиленгликолем (ПЭГ) [5] (рис. 2, *a*).

Олеиновая кислота образует сильные химические связи с аморфными наночастицами оксида железа, адсорбция ее на их поверхности приводит к уменьшению агрегации, однако затрудняет способность диспергироваться в жидких средах. Для перевода частиц магнетита в гидрофильную форму, что необходимо для биологического применения, их поверхность функционализируют путем дополнительной обработки амфифильными веществами, несущими гидрофобные и гидрофильные группы. Гидрофобный сегмент ПЭГ образует бислои своими углеводородными цепями, в то время как его гидрофильные группы экспонируются во внешнюю среду, обеспечивая тем самым стабильную дисперсию в жидкой фазе. Присоединение ПЭГ цепочек к поверхности наночастиц приводит к уменьшению их клиренса ретикулоэндотелиальной системой, снижению токсичности, уменьшению эндоплазматической деградации, усилению стабильности наночастиц, увеличению периода их полураспада [9], а также обеспечивает лучшую коллоидную стабильность и иммобилизацию биомолекул на поверхности магнетита Fe_3O_4 .

Наночастицы с магнитными свойствами можно дополнительно стабилизировать с помощью белка, в частности альбумина (см. рис. 2, *б*). При этом альбумин увеличивает их

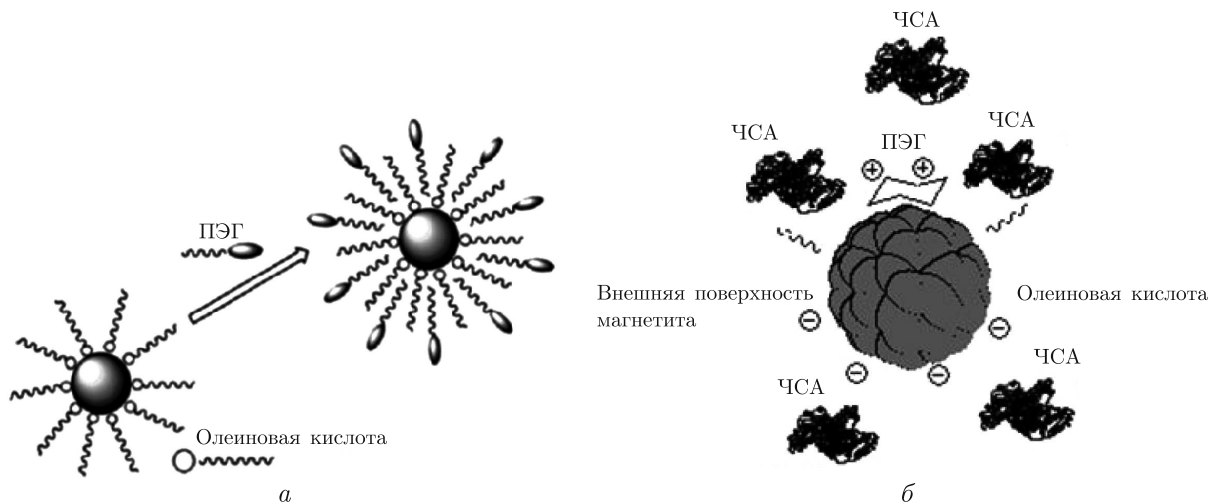


Рис. 2. Модификация наночастиц магнетита Fe_3O_4 олеиновой кислотой и ПЭГ (а) и человеческим сывороточным альбумином (б). Схематическое изображение

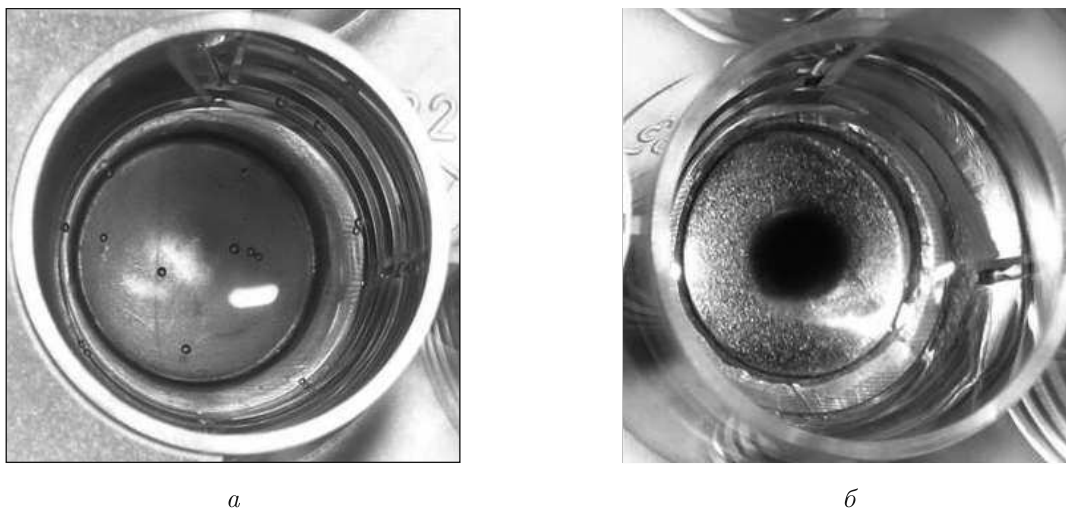


Рис. 3. Поведение наночастиц магнетита Fe_3O_4 в магнитном поле: а — буферный раствор; б — раствор альбумина

функциональность и биосовместимость. В результате получают устойчивые протеин-ферромагнитные жидкости, где белок действует как полиэлектролит. Доказательством тому, что альбуминовая молекула способна обеспечить стабильность наночастиц Fe_3O_4 , служит следующий эксперимент, в котором исходный раствор функционализированного олеиновой кислотой и ПЭГ магнетита был помещен в две лунки на планшете и оставлен на 4 ч в магнитном поле. По истечении этого времени на дне в центре обеих лунок образовался осадок магнетита Fe_3O_4 в виде капли темно-коричневого цвета. Убрав надосадочную жидкость, представляющую собой раствор стабилизирующих веществ, и заменив ее на равный объем буферного раствора в одной лунке или на раствор ЧСА — в другой, планшет оставили еще на 24 ч в магнитном поле. Спустя сутки была обнаружена разница в поведении наночастиц в лунке с буферным раствором (рис. 3, а) и с раствором альбумина (б). На

фотографии четко видно, что в ячейке без альбумина частички магнетита Fe_3O_4 расположились на дне, равномерно покрыв всю его площадь, а в ячейке с альбумином — собрались в центре, образовав темно-коричневую каплю (подобную картину мы наблюдали при экспозиции в магнитном поле исходного неразбавленного раствора магнетита). Вероятнее всего, это связано с отсутствием стабилизирующих веществ в буферном растворе, способных оказывать поддерживающее действие на наночастицы. Это предположение было проверено методом дифференциальной сканирующей микрокалориметрии, показавшей, что термограмма плавления альбумина, растворенного в буферном растворе, контактировавшем с частицами Fe_3O_4 (см. рис. 3, *а*), по своим характеристикам полностью совпадает с таковой для коммерческого препарата ЧСА, растворенного в исходном натрий-фосфатном буфере (рисунок не представлен).

Добавление в ячейку 2 мл белка обеспечивает им стабильность и предотвращает седиментацию (см. рис. 3, *б*). При этом наблюдается незначительное снижение исходной концентрации ЧСА в лунке после контакта с частицами магнетита Fe_3O_4 , а именно с 5,83 до 5,07 мг/мл. Следовательно, 1,52 мг ЧСА оказалось достаточно для поддержания частиц магнетита Fe_3O_4 в стабильном состоянии. В отличие от нативных наночастиц Fe_3O_4 (см. рис. 1, *а*) наночастицы в комплексе с альбумином практически равномерно распределены в жидкой фазе и не образуют крупных агрегатов (см. рис. 1, *б*).

Процесс взаимодействия наночастиц магнетита с альбумином был проанализирован методом дифференциальной сканирующей микрокалориметрии. На рис. 4, *а* представлены термограммы плавления комплексов обезжиренного ЧСА с наночастицами Fe_3O_4 , приготовленных при разных молярных соотношениях белка и магнетита. Из рисунка видно, что исходная эндотерма денатурации, принадлежащая препарату обезжиренного ЧСА (кривая 1), представляет собой монопик с температурой плавления 61 ± 1 °С, имеет достаточно большую амплитуду подъема кривой над базовой линией и величину энтальпии плавления, равную 257 кДж/моль. Процесс термической денатурации протекает в интервале 54–68 °С и характеризует необратимое разрушение междоменных и внутримолекулярных связей белка, обеспечивающих его нативную конформацию.

Нагрузка альбумина наночастицами магнетита Fe_3O_4 в молярном соотношении 1/1 (см. рис. 4, *а*, кривая 2) приводит к увеличению температуры плавления на 1 °С, уменьшению амплитуды подъема эндотермы и расширению температурного диапазона, в котором происходит процесс термической денатурации комплекса, а именно с 68 до 77 °С. Наблюдаемые изменения можно объяснить следующим образом: при взаимодействии магнетита Fe_3O_4 с молекулой ЧСА конформация последней изменяется, что отражается на форме кривой плавления, а увеличение температуры денатурации свидетельствует о появлении дополнительной связи между альбуминовой молекулой и функционализирующим агентом, в данном случае олеиновой кислотой или ПЭГ. Следует отметить, что, казалось бы, незначительное увеличение температуры плавления на 1 °С при нагрузке альбумина наночастицами Fe_3O_4 по сравнению с таковой, характерной для исходной ненагруженной молекулы обезжиренного ЧСА, тем не менее, говорит о высоком сродстве магнетита к молекуле белка. Похожая тенденция характерна для веществ, имеющих константу ассоциации $K_{\text{асс}} > 10^5$ /моль [10].

При добавлении еще 1 моля магнетита Fe_3O_4 к обезжиренному альбумину (см. рис. 4, *а*, кривая 3) происходит дальнейшее “распластывание” термограммы вдоль температурной оси (диапазон термоденатурации составляет уже 53–84 °С) и появление второго высоко-температурного максимума в области $74 \pm 0,5$ °С, имеющего первоначально небольшую амплитуду подъема над базовой линией. Добавление 3 или 5 молей наночастиц Fe_3O_4 к мо-

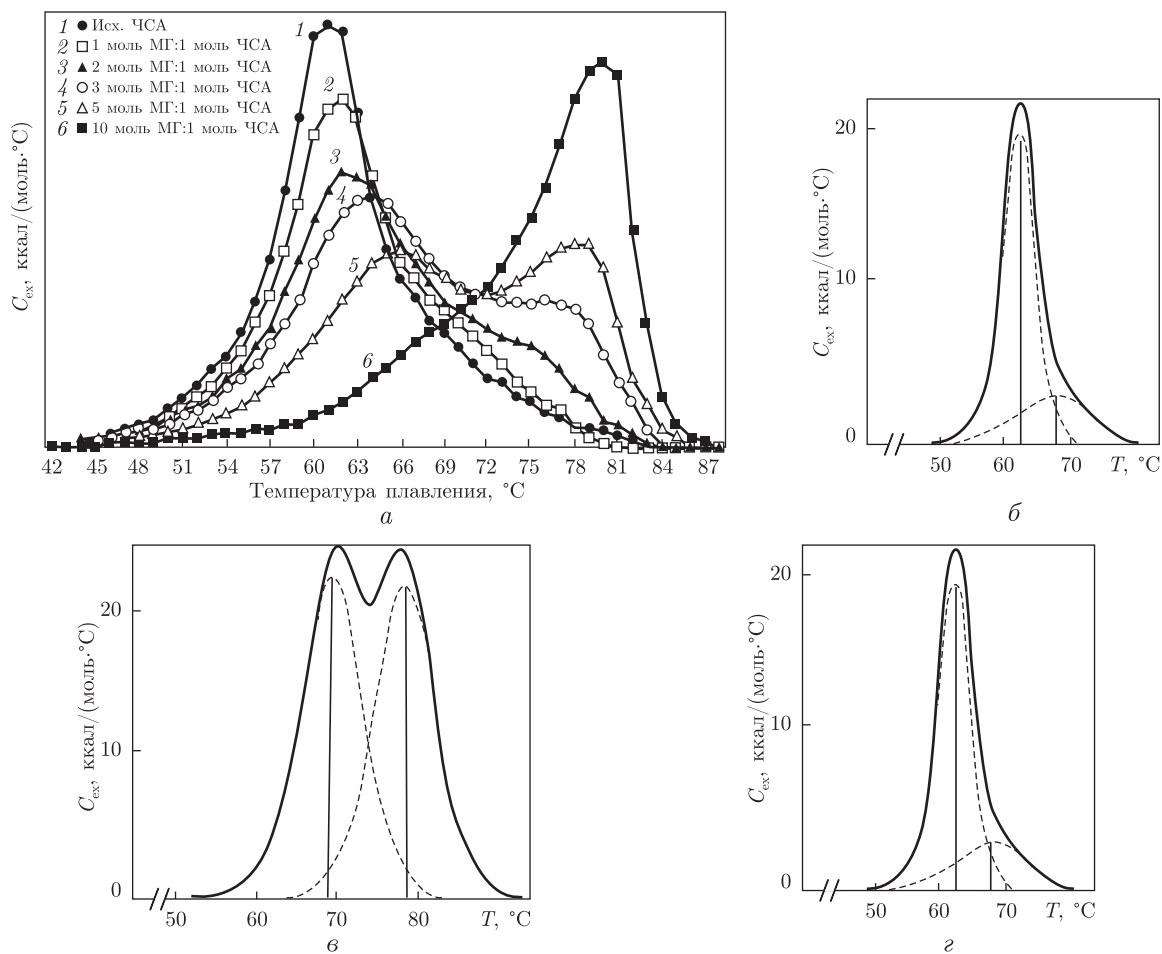


Рис. 4. Термограммы плавления комплексов человеческого сывороточного альбумина (ЧСА) с наночастицами магнетита (МГ) Fe_3O_4 (а) и человеческого сывороточного альбумина до (б) и после нагрузки двумя молями: варфарина (в) и диазепамом (з)

лекуле ЧСА (см. рис. 4, а, кривые 4 и 5) вызывает, помимо сдвига диапазона плавления в область высоких температур, также увеличение вклада второго высокотемпературного максимума в общую эндотерму денатурации. Десятикратная нагрузка молекулы альбумина магнетитом (см. рис. 4, а, кривая б) приводит к резкому изменению характера термограммы плавления по сравнению с таковой для исходной ненагруженной молекулы ЧСА (см. рис. 4, б). В данном случае наблюдается доминирующий второй высокотемпературный максимум с температурой плавления 80 ± 1 °C и энтальпией плавления 430 кДж/моль, а также едва определяемый первый максимум с температурой плавления 70 ± 1 °C.

Чем объясняется появление бимодальности в характере термограмм плавления? Ранее при изучении взаимодействия различных лекарственных препаратов с молекулой альбумина сыворотки методом дифференциальной сканирующей микрокалориметрии мы обратили внимание на то, что в одних случаях при нагрузке ЧСА появляется бимодальность, а в других — нет. Так, например, при нагрузке лекарственными препаратами варфарином и диазепамом (см. рис. 4, в, з) отмечалось различное поведение термограмм плавления соответствующих комплексов. Из рис. 4, в видно, что при нагрузке белка варфарином ам-

плитуда подъема второго высокотемпературного максимума ($T = 80\text{ }^{\circ}\text{C}$) на кривой плавления возрастает, а сама эндотерма принимает выраженный бимодальный характер. В случае с диазепамом (см. рис. 4, *з*) кривая практически не изменяет свою форму и лишь смещается вправо относительно температурной оси в область высоких температур. Оба эти препарата имеют практически равные и достаточно высокие константы ассоциации с молекулой альбумина — $3,3 \cdot 10^5$ и $3,8 \cdot 10^5$ моль⁻¹ для варфарина и диазепама соответственно, однако первый является специфическим маркерным лигандом лекарственного центра связывания I (Site I), а второй — центра II (Site II) [11]. В молекуле ЧСА Site I расположен во втором ПА домене, а Site II — в третьем. Следовательно, наблюдаемые различия в характере термограмм плавления при титровании варфарином и диазепамом косвенно отражают особенности плавления отдельных доменов ЧСА при нагрузке дискретных центров связывания маркер-специфическими лигандами.

На основании полученных данных можно сделать следующие выводы.

Молекула альбумина оказывает стабилизирующее действие на наночастицы магнетита Fe_3O_4 , предохраняя их от агрегирования. Наночастицы магнетита Fe_3O_4 , обработанные олеиновой кислотой и ПЭГ, обладают высоким сродством к молекуле альбумина (константа ассоциации (K_{acc}) не ниже 10^5 моль⁻¹). В процессе взаимодействия наночастиц Fe_3O_4 с ЧСА происходит изменение конформации белковой молекулы, отражающееся на термограммах плавления. Основной регион связывания наночастиц магнетита Fe_3O_4 , функционализированных олеиновой кислотой и ПЭГ, с ЧСА предположительно расположен во втором ПА домене и соответствует первому (Site I) лекарственному центру связывания альбуминовой молекулы.

Наблюдаемые конформационные переходы, возникающие при взаимодействии наночастиц Fe_3O_4 с альбумином, являются важной информацией при создании ферромагнитных жидкостей, предназначенных для векторной нанотерапии злокачественных новообразований.

Исследования проведены при поддержке целевой комплексной программы фундаментальных исследований НАН Украины “Фундаментальные нанотехнологии” в рамках выполнения научного проекта “Комплексный проект: Взаимодействие наноструктурных материалов с нормальными и опухолевыми клетками, разработка методов доставки, безопасность их использования”.

1. Aggarwal P., Hall J. B., McLeland C. B. et al. Nanoparticle interaction with plasma proteins as it relates to particle biodistribution, biocompatibility and therapeutic efficacy // Adv. Drug. Deliv. Rev. – 2009. – **61**, No 6. – P. 428–437.
2. Berry C. C., Charles S., Wells S. et al. The influence of transferrin stabilised magnetic nanoparticles on human dermal fibroblasts in culture // Int. J. Pharm. – 2004. – **269**, No 1. – P. 211–225.
3. Alexiou C., Arnold W., Klein R. J. et al. Locoregional cancer treatment with magnetic drug targeting // Cancer Res. – 2000. – **60**, No 23. – P. 6641–6648.
4. Jain T. K., Reddy M. K., Morales M. A. et al. Biodistribution, clearance, and biocompatibility of iron oxide magnetic nanoparticles in rats // Mol. Pharm. – 2008. – **5**, No 2. – P. 316–327.
5. Nicolbs P., Saleta M., Troiani H. et al. Preparation of iron oxide nanoparticles stabilized with biomolecules: Experimental and mechanistic issues // Acta Biomater. – 2013. – **9**, No 1. – P. 4754–4762.
6. Clifffel D. E., Turner B. N., Huffman B. J. Nanoparticle-based biologic mimetics // Wiley Interdiscip Rev. Nanomed. Nanobiotechnol. – 2009. – **1**, No 1. – P. 47–59.
7. Nitta S. K., Numata K. Biopolymer-based nanoparticles for drug/gene delivery and tissue engineering // Int. J. Mol. Sci. – 2013. – **14**, No 1. – P. 1629–1654.
8. Zhang B., Xing Y., Li Z. et al. Functionalized carbon nanotubes specifically bind to alpha-chymotrypsin’s catalytic site and regulate its enzymatic function // Nano Lett. – 2009. – **9**, No 6. – P. 2280–2284.

9. Gillich T., Acikgoz C., Isa L. et al. PEG-Stabilized Core-Shell Nanoparticles: Impact of Linear versus Dendritic Polymer Shell Architecture on Colloidal Properties and the Reversibility of Temperature-Induced Aggregation // ACS Nano. – 2012. – 7, No 1. – P. 316–329.
10. Сарнацкая В. В. Структурно-функциональные особенности сывороточного альбумина у больных с терминальной стадией хронической почечной недостаточности и разработка методов удаления белок-ассоциированных уремических токсинов: Дис. ... д-ра биол. наук: 17.06.11. – Киев, 2011. – 289 с.
11. Sudlow G., Birkett D. J., Wade D. N. Spectroscopic techniques in the study of protein binding: the use of 1-anilino-8-naphthalenesulphonate as a fluorescent probe for the study of the binding of iophenoxic and iopanoic acids to human serum albumin // Mol. Pharmacol. – 1975. – 11, No 6. – P. 824–832.

Институт экспериментальной патологии,
онкологии и радиобиологии им. Р. Е. Кавецкого
НАН Украины, Киев

Поступило в редакцию 04.04.213

В. В. Сарнацка

Взаємодія функціоналізованих олеїновою кислотою і поліетиленгліколем наночастинок Fe_3O_4 з альбуміном

Вивчення взаємодії наночастинок магнетиту Fe_3O_4 з сироватковим альбуміном людини (САЛ) показало, що молекула білка надає наночастинкам магнетиту стабілізуючу дію, оберігаючи їх від агрегування у водному середовищі. Встановлено, що функціоналізовані олеїновою кислотою і ПЕГ наночастинки Fe_3O_4 мають високу спорідненість до альбумінової молекули ($C_{\text{асс}} \geq 10^5$ /моль). При взаємодії магнетиту з САЛ відбуваються конформаційні переходи білкової молекули, що знаходяться в області зв'язування, розташованій в другому ІІА домені, що збігається з першим І лікарським центром зв'язування (Site I) альбумінової молекули. Інформація про локалізацію центрів асоціації та конформаційні переходи, що виникають при взаємодії наночастинок Fe_3O_4 з ЧСА, дозволить визначити їх оптимальне молярне співвідношення, яке забезпечує стабілізацію наночастинок у рідкій фазі і максимально зберігає транспортну ємність самого альбуміну у відношенні до протипухлинних препаратів, що є актуальним при розробці векторної лікарської терапії онкологічних хворих.

V. V. Sarnatskaya

Interaction of magnetite Fe_3O_4 nanoparticles functionalized with oleic acid and polyethylene glycol with albumin

In the study of the interaction between magnetite Fe_3O_4 nanoparticles with human serum albumin (HSA), it has been established that the protein molecule exerts a stabilizing effect toward magnetite Fe_3O_4 nanoparticles preserving them from aggregation in aqueous medium. It has been shown that Fe_3O_4 nanoparticles functionalized with oleic acid and polyethylene glycol (PEG) possess a high affinity toward albumin molecule ($C_{\text{ass}} \geq 10^5$ /Mole). During the interaction between magnetite and HSA, there occur conformation transitions of the protein molecule related to the binding region, which is located in the II A domain and coincides with the first (Site I) drug binding center of albumin molecule. Information about the localization of association centers and conformation transitions, which emerge during interactions between Fe_3O_4 nanoparticles with HSA, will allow one to determine their optimal molar ratio providing the stabilization of nanoparticles in the liquid phase and maximally restoring the transport capacity of albumin toward anticancer preparations, what is important for the development of targeted chemotherapy of cancer patients.



УДК 591.436-116.9:577.161.1

І. О. Шмараков, Ю. Д. Морозевич, В. С. Бленер, М. М. Марченко

Біохімічні аспекти сигнальної функції ретиноїдів при регенерації печінки

(Представлено членом-кореспондентом НАН України С. О. Костеріним)

Досліджено роль рецепторів ретиноевої кислоти та канонічної сигналізації ретиноїдів у регенерації печінки. З використанням моделі клітинно-специфічної абляції рецепторів ретиноевої кислоти шляхом активації домінуючої негативної ізоформи (RAR α DN) показано, що необхідною умовою для повноцінної регенерації печінки, викликаній частковою гепатектомією, є реалізація ретиноевою кислотою її сигнальної функції, опосередкованої взаємодією зі специфічними ядерними рецепторами, як складова регенеративної відповіді. Функціонування ретиноїдозалежного сигнального шляху за участю канонічних ядерних рецепторів ретиноевої кислоти життєво важливе як для печінки при її гострому ураженні, так і для організму в цілому.

Зростаючий попит на нові стратегії у регенеративній медицині та попередженні раку потребує ґрунтовного розуміння молекулярних механізмів, які контролюють тканинно-специфічну клітинну проліферацію. Регенеруюча печінка — унікальна модель, що дозволяє використовувати біохімічні, генетичні та біотехнологічні засоби для розкриття молекулярних механізмів і вдосконалення стратегії метаболічної корекції патологій печінки [1–3]. Визначальна роль у повноцінній трансдукції сигналу відводиться ядерним рецепторам — представникам суперродини білкових транскрипційних регуляторів, що включає лігандозалежні рецептори ретиноевих кислот, стероїдних і тиреоїдних гормонів, вітаміну D₃ та інших ліпофільних лігандів. Вказані білкові фактори залучені в передачу внутрішньоклітинного сигналу, необхідного для ембріогенезу, органогенезу, клітинної проліферації, диференціації та гомеостазу [4]. Численні представники ядерних рецепторів, як і гени, що містять респонсивні елементи для їх гомо- та гетеродимерів, експресуються в печінці [4].

Особливу увагу в метаболічному контролі функціонування печінки та організму привертають ретиноїди (вітамін А та його метаболіти). Ретиноева кислота (РК) — основний транскрипційно активний ретиноїд — залучена у регуляцію більш ніж 500 генів [5]. Повністю-*транс*- та 9-*цис*-ізомери РК регулюють транскрипцію шляхом зв'язування з одним із шести ядерних рецепторів — рецепторами РК (RAR α , β , γ) та ретиноїд Х рецепторами

© І. О. Шмараков, Ю. Д. Морозевич, В. С. Бленер, М. М. Марченко, 2013

(RXR α , β , γ). Основна частина ретиноїдів (до 70%) локалізована в печінці, де депонується у вигляді ретинілефірів у спеціалізованих ліпідних краплях стелатних клітин, на які припадає до 80% запасів ретиноїдів печінки [6]. Цілком очевидно, що така висока концентрація ретиноїдів у печінці зумовлена необхідністю виконання цими біоактивними метаболітами важливих функцій, особливо у випадку гострого чи хронічного ураження органа, що потребує миттєвої регенеративної відповіді та підтримки метаболічного гомеостазу організму [7]. Водночас процеси гострого та хронічного ураження печінки (цироз, фіброз, неалкогольне ожиріння, гепатоклітинний рак) супроводжуються масивною втратою запасів ретиноїдів та поглиблюються при їх нестачі, що свідчить про безпосередню участь метаболітів вітаміну А в процесах регульованого відновлення тканини печінки [7].

У світлі розкриття сигнальної та метаболічної ролі ядерних рецепторів у функціонуванні тканин і органів залишається відкритим питання залучення цих білкових регуляторів у розвиток патологічних процесів та можливостей їх використання в метаболічній корекції патологій. Мета роботи — встановити роль рецепторів РК та канонічної сигналізації ретиноїдів у регенерації печінки.

Дослідження проводили на мишах масою 25–30 г та віком 2,5–3 міс., які знаходилися на стандартному раціоні віварію. Тварини були люб'язно надані лабораторією біології ретиноїдів Колумбійського університету міста Нью-Йорк, США. Утримання тварин та маніпуляції з ними проводили згідно з положеннями “Європейської конвенції про захист хребетних тварин, що використовуються для дослідних та наукових цілей” (Страсбург, 1986) та “Загальних етичних принципів експериментів на тваринах”, ухвалених Першим національним конгресом з біоетики (Київ, 2001).

Використані в експериментальних дослідженнях тварини були трансгенними і містили у геномі ген домінантної негативної форми α ізоформи рецептора РК (*Rar α DN*). Оскільки повноцінна сигналізація ретиноїдів, яка опосередковується через канонічні рецептори, необхідна в процесах ембріонального та постембріонального розвитку, промоторна ділянка трансгена домінантної негативної форми екранувалася термінуючою послідовністю, відмежованою *loxP*-сайтом, що унеможливило транскрипцію вказаного трансгена. З метою селективної тканиноспецифічної активації транскрипції гена домінантної негативної форми тварин-носіїв цього гена схрещували з носіями трансгена рекомбінази *Cre*, зчепленої з промотором гена альбуміну. Оскільки ген альбуміну експресується тільки в печінці, яка є єдиним джерелом сироваткового альбуміну, експресія трансгена рекомбінази *Cre*, зчепленого з альбуміновим промотором, відбувається виключно в печінці. У результаті проведеного схрещування двох ліній трансгенних мишей отримали потомство з активованим у гепатоцитах геном домінантної негативної α ізоформи рецептора РК, не впливаючи на сигналізацію ретиноїдів в інших (у тому числі ембріональних) екстрагепатних тканинах (I група, дослідна, *Rar α DN^{lox/lox}; Alb-Cre^{+/+}*). Контрольну групу складали миші, отримані в результаті схрещування тварин з геном *Rar α DN* і тварин без гена *Cre*-рекомбінази (II група, контрольна, *Rar α DN^{lox/lox}; Alb-Cre^{-/-}*).

Білковий продукт гена домінантної негативної α ізоформи рецептора РК інгібує функціональну активність всіх ізоформ RAR, викликаючи їх абляцію, шляхом конкурентного незворотного зв'язування з респонсивними елементами (RARE) ретиноїдзалежних генів [8]. У результаті зникнення вільних місць для зв'язування повноцінні рецептори елімінуються шляхом протеолізу, а утворена РК, як сигнальна молекула, не може виконувати свою месенджерну функцію внаслідок відсутності лігандзв'язуючого домена в мутантного рецептора [8, 9].

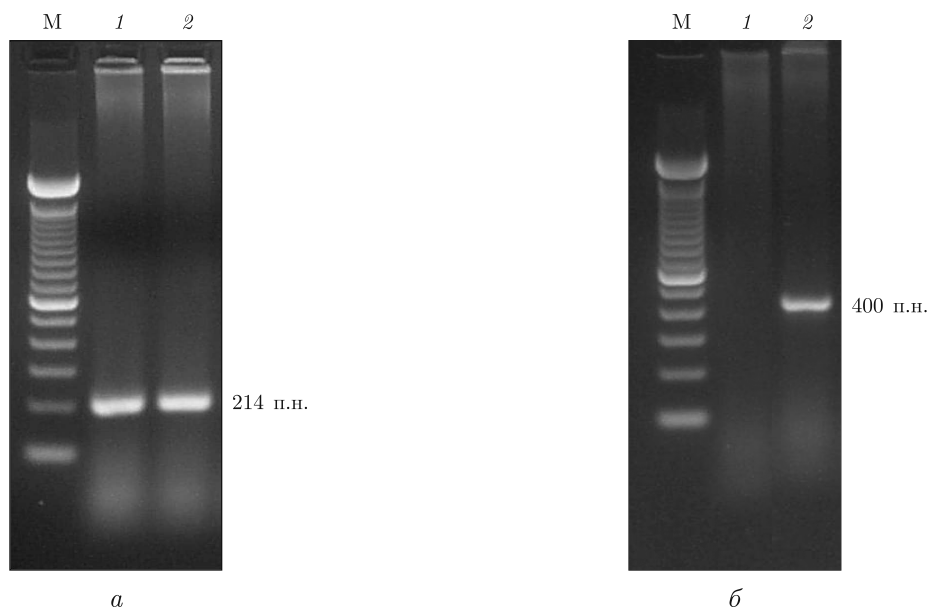


Рис. 1. Електрофореграма розподілу специфічних продуктів ампліфікації трансгенів *RaraDN* (а) та *Cre* (б): 1, 2 — результати генотипування тварин контрольної (*RaraDN^{flox/flox}; Alb-Cre^{-/-}*) та дослідної (*RaraDN^{flox/flox}; Alb-Cre^{+/+}*) груп відповідно; М — маркерний препарат Gene Ruler™ DNA Ladder Mix

Генотипування трансгенних тварин проводили методом полімеразної ланцюгової реакції (ПЛР) з використанням специфічних праймерів. Тварини кожної групи містили фланкований ген *RaraDN*, що підтверджувалося появою амплікона розміром 214 п. н. (рис. 1). Водночас геномна ДНК лише тварин дослідної групи давала позитивну ПЛР з появою амплікона розміром 400 п. н., що свідчило про наявність гена рекомбінази *Cre*, необхідної для активації домінантної негативної α ізоформи рецептора РК (див. рис. 1). Тварин дослідної і контрольної груп піддавали частковій гепатектомії (ЧГЕ), яку проводили в ранкові години в умовах анестезії за методом С. Mitchell, Н. Willenbring [10]. Евтаназію тварин (5–6 тварин на кожну групу) здійснювали під легким ефірним наркозом на 0, 12-ту, 24-ту, 36-ту, 48-му, 72-гу год та 7-му добу (168 год) після проведення ЧГЕ. Тварин зважували, видаляли регенеровану частину печінки, яку використовували для подальшого аналізу.

Сироватку отримували шляхом центрифугування крові при 8000 g протягом 15 хв. Ступінь гострого ураження тканини печінки оцінювали за ферментативною активністю аланінамінотрансферази в сироватці крові, яку визначали за допомогою стандартного набору (“Фелісіт Діагностика”, Дніпропетровськ) відповідно до інструкції виробника і виражали в МО/л. Рівень глюкози визначали глюкозооксидазним методом за допомогою стандартного набору (“Фелісіт Діагностика”, Дніпропетровськ) відповідно до інструкції виробника і виражали в мг/дкл. Ступінь фрагментації ядерної ДНК клітин печінки оцінювали методом мікроелектрофорезу ДНК індивідуальних клітин (метод “ДНК-комет”) [11]. Для максимально об’єктивної оцінки пошкодженості ядерної ДНК розраховували показник “моменту хвоста” з використанням програми TriTek CometScore™. Статистичну обробку результатів проводили з використанням *t*-критерію Стьюдента. Вірогідною вважали різницю при $P < 0,05$.

Результати досліджень показали, що сигналізація ретиноїдів через канонічні рецептори РК необхідна для повноцінної регенеративної відповіді ураженої тканини печінки. Аналіз

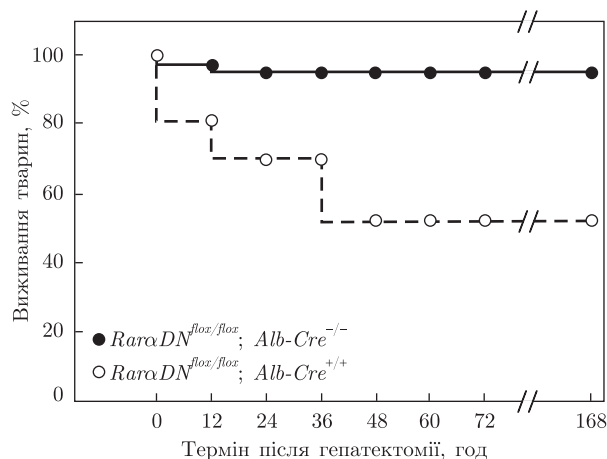


Рис. 2. Кумулятивна крива виживання тварин дослідної ($Rar\alpha DN^{flox/flox}; Alb-Cre^{+/+}$) і контрольної ($Rar\alpha DN^{flox/flox}; Alb-Cre^{-/-}$) груп після часткової гепатектомії

експериментальних даних засвідчив, що за умови 100% постопераційного виживання тварин обох груп вже на 12-ту год рівень летальності тварин дослідної групи становив 20%, досягаючи більше 50% через 2 доби (48 год). На противагу цьому виживання тварин контрольної групи знаходилося у межах експериментальної похибки та становило більше 95% (рис. 2).

Враховуючи високий рівень летальності тварин дослідної групи, в подальших дослідженнях ми сконцентрувалися на аналізі показників, отриманих у перші 2 доби після ЧГЕ, оскільки повнота метаболічної відповіді на гостре ураження печінки саме в цей період виявляється життєво важливою для організму. Реалізація первинного регенераційного сигналу спрямована передусім на активацію проліферативних процесів у частці печінки, що залишилася неушкодженою [3]. У результаті синхронного поділу кількість гепатоцитів протягом перших діб після гепатектомії повинна досягти величини, що відповідала б метаболічним потребам організму, а печінка — відновити порушений гомеостаз.

За даними аналізу постгепатектомійного відновлення паренхіми печінки встановлено зниження темпів її регенерації у тварин з порушеною канонічною сигналізацією ретиноїдів вже починаючи з 24-ї год. Водночас рівень відновлення паренхіми печінки тварин контрольної групи досягав вихідних величин (94%) вже на 72-гу год, у тварин з $RAR\alpha DN$ цей показник був нижчий на 26% і становив лише 60% доопераційної величини (рис. 3). Гістологічний аналіз регенеруючої печінки тварин дослідної групи показав наявність зон вогнищового некрозу вже через 24 год після ЧГЕ та значне статистично достовірне збільшення аланінамінотрансферазної активності в сироватці крові, що вказувало на глибокі порушення паренхіми. Аналіз ступеня фрагментації ядерної ДНК виявив ознаки її деградації в клітинах печінки тварин з активованою домінантною негативною формою α ізоформи рецептора РК, що виражалося в появі набору безладних фрагментів розмірами від 20 до 2,5 т. п. н. Водночас переважання комет S_3 і S_4 типу при проведенні мікроелектрофорезу ДНК гепатоцитів підтверджувало некротичний тип загибелі клітин регенеруючої печінки тварин з домінантною негативною α ізоформою RAR. У цій групі вже з 12-ї год після гепатектомії виявлялися комети з величиною моменту хвоста більше 50 мкм, а на 48-му год для більшої частини комет цей показник знаходився в діапазоні 100–200 мкм.

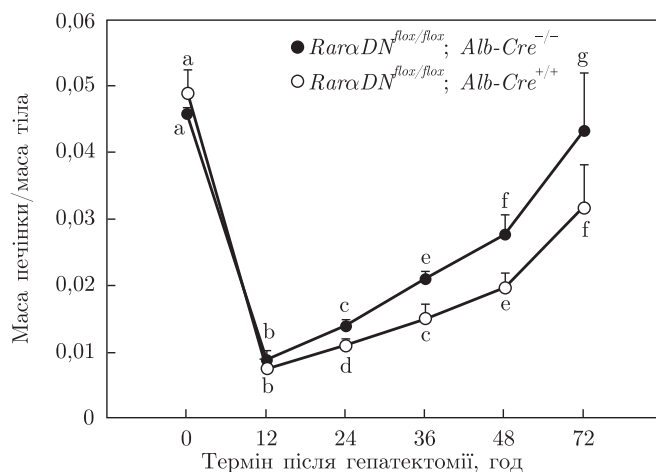


Рис. 3. Відновлення маси печінки у тварин дослідної ($RaraDN^{flox/flox}; Alb-Cre^{+/+}$) і контрольної ($RaraDN^{flox/flox}; Alb-Cre^{-/-}$) груп після часткової гепатектомії. Величини з буквеними індексами а–g — статистично достовірно відрізняються, $P < 0,05$

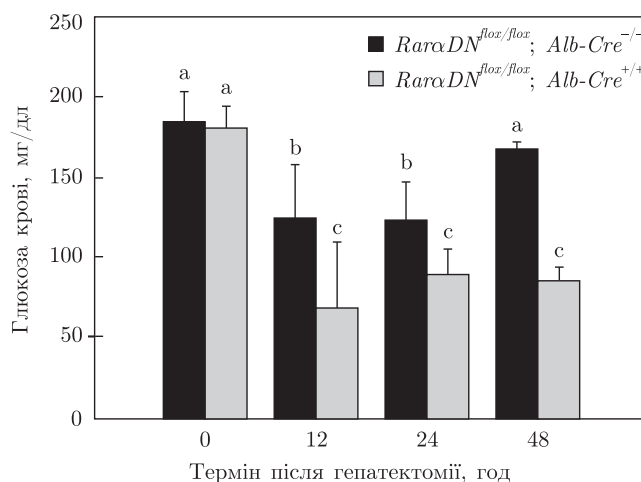


Рис. 4. Рівень глюкози в сироватці крові мишей після гепатектомії. Величини з буквеними індексами а, b, c статистично достовірно відрізняються, $P < 0,05$

Виявлене порушення регенераційних процесів супроводжувалося одночасним порушенням метаболічних функцій печінки. Характерною ознакою постопераційних метаболічних змін є розвиток енергетичної недостатності організму, що супроводжується гіпоглікемією вже у перші години після гепатектомії (рис. 4). Оскільки запаси глікогену після резекції 70% паренхіми печінки є обмеженими, значне навантаження лягає на глюконеогенез. Проте цей метаболічний шлях виявляється інгібованим, враховуючи пряму залежність експресії ключового ензиму глюконеогенезу фосфоенолпіруваткарбоксікінази від транскрипційної регуляції за прямою участю ретиноїдів [12]. Якщо у тварин контрольної групи рівень глюкози крові знижувався не більш ніж на 30% і повертався до вихідних значень через 48 год (див. рис. 4), у мишей з активованою домінантною негативною формою RAR цей показник зменшувався в три рази і не досягав навіть 50% доопераційної величини.

Отже, необхідною умовою для повноцінної регенерації печінки, викликаной ЧГЕ, є реалізація РК її сигнальної функції, опосередкованої взаємодією зі специфічними ядерними рецепторами, як складова регенеративної відповіді. Функціонування ретиноїдзалежного сигнального шляху за участю канонічних ядерних рецепторів РК є життєво важливим як для печінки при її гострому ураженні, так і для організму в цілому.

1. Fausto N., Campbell J. S., Riehle K. J. Liver regeneration // *Hepatology*. – 2006. – **43**, No 1. – P. 45–53.
2. Michalopoulos G. K. Liver regeneration after partial hepatectomy: critical analysis of mechanistic dilemmas // *Am. J. Pathol.* – 2010. – **176**. – P. 2–13.
3. Taub R. Liver regeneration: from myth to mechanism // *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* – 2004. – **5**. – P. 836–847.
4. Bastien J., Rochette-Egly C. Nuclear retinoid receptors and the transcription of retinoid-target genes // *Gene*. – 2004. – **328**. – P. 1–16.
5. Balmer J., Blomhoff R. Gene expression regulation by retinoic acid // *J. Lipid Res.* – 2002. – **43**. – P. 1773–1808.
6. Blaner W. S., O'Byrne S. M., Wongsiriroj N. et al. Hepatic stellate cell lipid droplets: a specialized lipid droplet for retinoid storage // *Biochim. Biophys. Acta*. – 2009. – **1791**, No 6. – P. 467–473.
7. Shirakami Y., Lee S., Clugston R., Blaner W. Hepatic metabolism of retinoids and disease associations // *Ibid.* – 2012. – **1821**. – P. 124–136.
8. Damm K., Heyman R. A., Umesono K., Evans R. M. Functional inhibition of retinoic acid response by dominant negative retinoic acid receptor mutants // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. – 1993. – **90**. – P. 2989–2993.
9. Yanagitani A., Yamada S., Yasui S. Retinoic Acid Receptor & Dominant Negative Form Causes Steatohepatitis and Liver Tumors in Transgenic Mice // *Hepatology*. – 2004. – **40**, No 2. – P. 366–373.
10. Mitchell C., Willenbring H. A reproducible and well-tolerated method for 2/3 partial hepatectomy in mice // *Nat. Protoc.* – 2008. – **3**. – P. 1167–1170.
11. Камінський В. О., Луцик М. Д. Аналіз фрагментації ДНК індивідуальних клітин методом гель-мікроелектрофорезу: модифікація фарбування солями срібла для одержання постійних препаратів // *Укр. біохім. журн.* – 2005. – **77**, № 6. – С. 105–108.
12. McGrane M. M. Vitamin A regulation of gene expression: molecular mechanism of a prototype gene // *J. Nutr. Biochem.* – 2007. – **18**. – P. 497–508.

Чернівецький національний університет
ім. Юрія Федьковича

Надійшло до редакції 06.03.2013

И. А. Шмараков, Ю. Д. Морозевич, В. С. Бленер, М. М. Марченко

Биохимические аспекты сигнальной функции ретиноидов при регенерации печени

Исследована роль рецепторов ретиноевой кислоты и канонической сигнализации ретиноидов в регенерации печени. С использованием модели клеточно-специфической абляции рецепторов ретиноевой кислоты путем активации доминантной негативной изоформы (RAR α DN) показано, что необходимым условием для полноценной регенерации печени, вызванной частичной гепатэктомией, является реализация ретиноевой кислотой ее сигнальной функции, опосредованной взаимодействием со специфическими ядерными рецепторами, как составная регенеративного ответа. Функционирование ретиноидзависимого сигнального пути с участием канонических ядерных рецепторов ретиноевой кислоты жизненно важно как для печени при ее остром поражении, так и для организма в целом.

I. O. Shmarakov, Yu. D. Morozevich, W. S. Blaner, M. M. Marchenko

Biochemical aspects of retinoid signaling function during liver regeneration

The work is devoted to the role of retinoic acid receptors and retinoid canonical signaling in liver regeneration. Using a model of cell-specific ablation of retinoic acid receptors by activation of dominant negative isoform (RAR α DN), it is shown that an essential condition for a full liver regeneration caused by partial hepatectomy is the realization of retinoic acid signaling functions mediated by interaction with specific nuclear receptors as a component of regenerative response. Retinoid-dependent signaling pathway functioning, involving canonical nuclear retinoic acid receptors, is vital for the liver during its acute injury and organism as a whole.

Б. О. Цудзевич, І. В. Калінін

Вплив солей міді на функціонування антиоксидантної системи у тканинах щурів

(Представлено членом-кореспондентом НАН України С. О. Костеріним)

Досліджено вплив різних аніонів солей міді на біохімічні показники та функціонування антиоксидантної системи в тканинах щурів. Показано, що введення солей міді з різним аніонним складом в організм тварин впливає на кумуляцію досліджуваного елемента та біохімічні показники, а також функціонування антиоксидантної системи у тканинах щурів.

Загострення екологічної ситуації обумовлює необхідність вивчення механізмів адаптації живих організмів до важких металів як найнебезпечніших забруднювачів довкілля. Мідь потрапляє в навколишнє середовище в основному з відходами і стічними водами підприємств, а також широко використовується у сільському господарстві як фунгіцид для боротьби із шкідниками та захворюваннями рослин.

При надмірному надходженні сполук міді в організм можливе виникнення отруєнь, оскільки міді притаманні виражені кумулятивні властивості, при довготривалому надходженні міді в організм небезпечними є хронічні інтоксикації [1].

Важливу проблему становить дослідження корекції порушень метаболізму, що виявляються в клітинах людини і тварин внаслідок надходження в організм сполук цього важкого металу. Відомо, що іони важких металів, у тому числі й міді, активують процеси утворення активних форм кисню в різних типах клітин, провокуючи розвиток в організмі оксидативного стресу. Мідь і залізо в живих організмах тісно поєднані. Мідь слугує прискорювачем в окисних реакціях клітин, а також сприяє утворенню гемоглобіну, накопиченню заліза про запас. Метаболізм цинку був взаємозв'язаний із залізом і міддю, в ферментах цинк часто може заміщуватися міддю [2].

Незважаючи на те, що в літературі є багато робіт, присвячених розкриттю механізмів негативної дії міді на організм, проте актуальним залишається питання щодо функціональних змін та стану антиоксидантної системи у клітинах різних органів і тканин в умовах комбінованого впливу цих металів впродовж тривалого часу [3–6]. Дослідження щодо впливу різних аніонів солей важких металів у літературі відображено епізодично.

При проведенні дослідів у лабораторних умовах з різними солями одного й того самого металу виникає питання про вплив на біохімічні процеси не тільки безпосередньо металу (катиона), а й аніонної частини солі. Тому метою даної роботи було дослідження впливу різних аніонів солей міді на біохімічні показники та функціонування антиоксидантної системи в тканинах щурів.

Дослідження проводили на білих нелінійних щурах-самцях одного віку, масою 180–200 г, яких утримували за звичайних умов віварію. Було утворено чотири груп тварин: перша — контроль, друга — тваринам перорально вводили розчин міді сульфату, третя — щурам перорально вводили розчин міді нітрат, четверта — тваринам перорально вводили розчин міді хлорид. Інтоксикацію проводили в загальноновстановлених дозах [7, 8] впродовж

14 діб, потім щурів декапітували під ефірним наркозом та відбирали кров і печінку для подальших досліджень. Роботу проводили, згідно з конвенцією Ради Європи щодо захисту тварин, яких використовують у наукових цілях. Вміст металів у тканинах (кров, печінка) визначали на атомно-абсорбційному спектрофотометрі С-115 після спалювання зразків у азотній кислоті. Визначали активність: супероксиддисмутази (СОД, КФ 1.15.1.1) за [9]; каталази (КАТ, КФ 1.11.1.9) за [10]; глутатіонпероксидази (ГП, КФ 1.11.1.9) та глутатіон-трансферази (ГТ, КФ 2.5.1.18) за [11, 12]. Вміст відновленого глутатіону (GSH) визначали методом, описаним у статті [13]. Біохімічний аналіз крові (активність лужної фосфатази (ЛФ, КФ 3.1.3.1), аланінамінотрансферази (АлАТ, КФ 2.6.1.2), аспартатамінотрансферази (АсАТ, КФ 2.6.1.1), вміст глюкози, загального білка, сечовини, креатиніну) проводили за допомогою напівавтоматичного біохімічного аналізатора Microlab 300 (Нідерланди). Експериментальні дані обробляли статистично з використанням *t*-критерію Стьюдента [14]. Статистичні розрахунки проводили з використанням програми “Microsoft Excel 2007”.

Проведені дослідження показали, що отруєння міді сульфатом, міді нітратом та міді хлоридом призвело до збільшення міді в усіх досліджуваних тканинах. Так, у крові (табл. 1) концентрація міді збільшилась в 1,6 раза при отруєнні сульфатом та в 2 рази — нітратом і хлоридом міді відносно контрольної групи тварин.

У тканинах печінки вміст міді збільшився в 1,6 раза при отруєнні сульфатом і хлоридом та в 1,7 раза — нітратом міді відносно контрольної групи тварин.

Результати біохімічних досліджень сироватки крові щурів представлені в табл. 2.

Встановлено збільшення вмісту глюкози в 1,3 раза у тварин, інтоксикованих солями міді з різним аніонним складом, порівняно з контрольною групою тварин. Вміст загального білка знизився на 17, 20 й 18% у щурів, отруєних щурами іонами міді сульфатом, міді нітратом

Таблиця 1. Вміст міді в тканинах щурів за умов інтоксикації солями міді різного аніонного складу ($M \pm m$, $n = 8$)

| Групи тварин | Вміст міді, мг/кг | |
|----------------|-------------------|---------------|
| | у крові | у печінці |
| Контроль | 1,34 ± 0,15 | 2,82 ± 0,38 |
| Інтоксиковані: | | |
| міді сульфатом | 2,17 ± 0,42* | 4,43 ± 0,62* |
| міді нітратом | 2,73 ± 0,57* | 4,81 ± 0,73* |
| міді хлоридом | 2,56 ± 0,51* | 4,62 ± 0,816* |

* $p < 0,05$ відносно інтактних тварин.

Таблиця 2. Біохімічні показники крові щурів за умов інтоксикації солями міді різного аніонного складу ($M \pm m$, $n = 8$)

| Показники | Контроль | Щури інтоксиковані | | |
|----------------------|----------------|--------------------|-----------------------------------|-------------------|
| | | CuSO ₄ | Cu(NO ₃) ₂ | CuCl ₂ |
| Глюкоза, ммоль/л | 6,04 ± 0,76 | 7,63 ± 0,71* | 7,94 ± 0,65* | 7,82 ± 0,69* |
| Білок загальний, г/л | 74,52 ± 2,88 | 61,74 ± 1,94* | 59,42 ± 1,25* | 60,81 ± 1,72* |
| Сечовина, ммоль/л | 6,23 ± 0,91 | 11,41 ± 1,32* | 11,67 ± 1,71* | 11,73 ± 1,92* |
| Креатинін, мкмоль/л | 69,17 ± 6,23 | 102,30 ± 9,21* | 104,85 ± 9,52* | 103,28 ± 9,43* |
| АлАТ, од./л | 78,23 ± 7,26 | 133,10 ± 12,24* | 135,23 ± 12,37* | 134,40 ± 11,62* |
| АсАТ, од./л | 162,51 ± 13,92 | 254,23 ± 21,71* | 257,18 ± 23,84* | 255,71 ± 22,37* |
| ЛФ, од./л | 292,47 ± 28,11 | 536,21 ± 85,82* | 541,32 ± 88,13* | 538,46 ± 87,84* |

* $p < 0,05$ відносно контролю.

і міді хлоридом відповідно, щодо інтактних щурів. Збільшився вміст сечовини у 1,8 раза у трьох дослідних групах інтоксикованих тварин відносно контролю. Рівень креатиніну збільшився у 1,5 раза в усіх дослідних групах тварин, порівняно з групою контрольних тварин.

При інтоксикації іонами міді сульфатом активність усіх досліджуваних ферментів крові зросла, а саме АлАТ у 1,7 раза, АсАТ — у 2,2, ЛФ — у 1,8 раза щодо контрольної групи тварин. Разом з тим отруєння нітратом міді призвело також до зростання ферментативної активності крові, але це зростання було більшим, якщо порівнювати отруєння з групою щурів, яка зазнала інтоксикації іонами міді сульфатом та міді хлоридом. Результати досліджень активності супероксиддисмутази та каталази щурів зведено в табл. 3.

Інтоксикація іонами міді з різним аніонним складом призводить до зниження активності СОД і КАТ у досліджуваних тканинах щурів, найбільше зниження встановлено при інтоксикації іонами міді азотнокислої. Результати досліджень активності глутатіонзалежних ферментів тканин щурів демонструє табл. 4.

Встановлено, що інтоксикація щурів міддю сірчаною кислотою призводить до зниження в крові вмісту GSH (у 1,3 раза) та зниження активності ГП й ГТ (у 1,3 й 1,9 раза відповідно). Показано, що інтоксикація щурів міддю азотнокислою призводить до зниження в крові вмісту GSH (у 1,5 раза) та зменшення активності ГТ (у 2,2 раза), у той час як активність глутатіонпероксидази істотно не змінилася. Інтоксикація щурів міді хлоридом призводить до зниження в крові вмісту GSH (у 1,7 раза) та зменшення активності ГП й ГТ (у 1,3 і 2,0 раза відповідно) порівняно з контролем.

Таблиця 3. Активність супероксиддисмутази та каталази в тканинах щурів при дії іонів міді з різним аніонним складом ($M \pm m$, $n = 8$)

| Групи тварин | Кров | | Печінка | |
|-----------------------------------|--------------|----------------------|--------------|-----------------------|
| | СОД, ум. од. | КАТ, мкмоль/(л · хв) | СОД, ум. од. | КАТ, мкмоль/(мг · хв) |
| Контроль | 0,83 ± 0,05 | 11,23 ± 1,14 | 2,83 ± 0,32 | 0,18 ± 0,03 |
| Інтоксиковані: | | | | |
| CuSO ₄ | 0,68 ± 0,02 | 10,12 ± 0,93 | 2,68 ± 0,17 | 0,12 ± 0,02* |
| Cu(NO ₃) ₂ | 0,64 ± 0,03 | 9,14 ± 0,81 | 2,03 ± 0,12 | 0,10 ± 0,01* |
| CuCl ₂ | 0,66 ± 0,02* | 9,82 ± 0,63* | 2,29 ± 0,15* | 0,11 ± 0,02* |

* $p \leq 0,05$ відносно контролю.

Таблиця 4. Вміст глутатіону та активність глутатіонпероксидази і глутатіонтрансферази в тканинах щурів при дії іонів міді з різним аніонним складом ($M \pm m$, $n = 8$)

| Показник | Групи тварин | | | |
|----------------------------|--------------|-------------------|-----------------------------------|-------------------|
| | Контроль | інтоксиковані | | |
| | | CuSO ₄ | Cu(NO ₃) ₂ | CuCl ₂ |
| Кров | | | | |
| GSH, ммоль/л | 0,38 ± 0,04 | 0,29 ± 0,03* | 0,26 ± 0,02* | 0,22 ± 0,02* |
| ГП, ммоль/(хв · л) | 0,27 ± 0,12 | 0,21 ± 0,11* | 0,24 ± 0,01 | 0,21 ± 0,01* |
| ГТ, ммоль/(хв · л) | 68,03 ± 4,71 | 35,72 ± 3,68* | 30,81 ± 3,05* | 33,44 ± 3,42* |
| Печінка | | | | |
| GSH, мкмоль/мг білка | 0,80 ± 0,04 | 0,67 ± 0,05* | 0,51 ± 0,02* | 0,62 ± 0,03* |
| ГП, мкмоль/(хв · мг білка) | 0,37 ± 0,02 | 0,34 ± 0,03 | 0,31 ± 0,02 | 0,32 ± 0,02 |
| ГТ, мкмоль/(хв · мг білка) | 0,48 ± 0,05 | 0,46 ± 0,07 | 0,42 ± 0,03 | 0,45 ± 0,06 |

* Дані вірогідні ($p \leq 0,05$) у порівнянні з інтактними щурами.

Інтоксикація щурів міді сульфатом призводить до зниження у печінці вмісту GSH — у 1,2 раза порівняно з контрольними тваринами (див. табл. 4).

У печінці отруєння щурів іонами міді нітратом і міді хлоридом призводить до зниження вмісту GSH — у 1,6 раза й 1,3 раза відповідно порівняно з контрольними щурами. Разом з тим активність глутатіопероксидази і глутатіотрансферази у всіх дослідних групах залишалась без помітних змін.

Таким чином, в результаті проведених досліджень вперше показано, що введення солей міді з різним аніонним складом в організм тварин впливає на кумуляцію досліджуваного елемента та біохімічні показники, а також функціонування антиоксидантної системи в тканинах щурів.

1. *Профілактична токсикологія та медична екологія* / За заг. ред. І. М. Трахтенберга. – Київ: Авіцена, 2011. – 320 с.
2. *Цудзевич Б. О., Столяр О. Б., Калінін І. В., Южало В. Г.* Ксенобіотики: накопичення, детоксикація та виведення з живих організмів. – Тернопіль: Вид-во Тернопіл. нац. техн. ун-ту ім. Івана Пулюя, 2012. – 384 с.
3. *Цудзевич Б. О., Калінін І. В., Петрук Н. А.* Антиоксидантна система в тканинах щурів за умов інтоксикації важкими металами // *Совр. пробл. токсикології.* – 2012. – № 2. – С. 36–39.
4. *Беленічев І. Ф., Левицький Є. Л., Губський Ю. І. та ін.* Антиоксидантна система захисту організму (огляд) // Там само. – 2002. – № 3. – С. 24–31.
5. *Хижняк С. В., Прохорова А. О., Грищенко В. А. та ін.* Функціонування антиоксидантної системи щурів за дії кадмію // *Укр. біохім. журн.* – 2010. – **82**, № 4. – С. 105–111.
6. *Коржов В. И., Жадан В. Н., Коржов М. В.* Роль системы глутатиона в процессах детоксикации и антиоксидантной защиты // *Журн. АМН України.* – 2007. – **13**, № 1. – С. 3–20.
7. *Трахтенберг И. М., Тычинин В. А., Галакин Ю. Н.* Экспериментальные данные к анализу воздействия на организм тяжелых металлов // *Токсикол. вестн.* – 1994. – № 4. – С. 27–31.
8. *Трахтенберг И. М., Сова Р. Е., Шефтель В. О.* Проблема нормы в токсикологии: современные представления и методические подходы, основные параметры и константы. – Москва: Медицина, 1991. – 208 с.
9. *Орехович В. Н.* Современные методы в биохимии. – Москва: Медицина, 1977. – 268 с.
10. *Корольок М. А.* Метод определения активности каталазы в биологическом материале // *Лаб. дело.* – 1988. – № 2. – С. 31–34.
11. *Mannervik B.* Glutathione peroxidase // *Methods in enzymology.* – New York: Acad. Press. – 1985. – **113**. – P. 490–495.
12. *Власова С. Н., Шабунина Е. И., Перслегина А. И.* Активность глутатионзависимых ферментов эритроцитов при хронических заболеваниях печени у детей // *Лаб. дело.* – 1990. – № 8. – С. 19–21.
13. *Ellman G. L.* Tissue sulfhydryl groups // *Arch. Biochem. Biophys.* – 1959. – **82**, No 1. – P. 70–77.
14. *Кучеренко М. С., Бабенюк Ю. Д., Войцицький В. М.* Сучасні методи біохімічних досліджень. – Київ: Фітосоціоцентр, 2001. – С. 109–152.

ННЦ “Інститут біології” Київського
національного університету ім. Тараса Шевченка

Надійшло до редакції 18.01.2013

Б. А. Цудзевич, І. В. Калінін

Влияние солей меди на функционирование антиоксидантной системы в тканях крыс

Исследовано влияние различных анионов солей меди на биохимические показатели и функционирования антиоксидантной системы в тканях крыс. Показано, что введение солей меди с различным анионным составом в организм животных влияет на кумуляцию исследуемого элемента и биохимические показатели, а также функционирование антиоксидантной системы в тканях крыс.

B. A. Tsudzevich, I. V. Kalinin

Influence of copper salts on the functioning of the antioxidant system in rat tissues

The effect of various anions of copper salts on biochemical data and functioning of the antioxidant system in rat tissues is studied. The introduction of copper salts with different anions to the organism of animals affects the element cumulation and biochemical parameters, as well as the functioning of the antioxidant system in rat tissues.



УДК 616.432/.434.441-053.2:612.433.65:615.252

О. А. Вишневська, О. В. Большова,
член-кореспондент НАН України **М. Д. Тронько**

Вплив замісної терапії препаратами рекомбінантного гормону росту на стан гіпофізарно-тиреоїдної та гіпофізарно-наднирковозалозної систем у дітей допубертатного віку з соматотропною недостатністю

В дитячому відділенні ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В. П. Ко-місаренка НАМН України” вивчено вплив довготривалої терапії рГР на стан гіпофізарно-тиреоїдної і гіпофізарно-наднирковозалозної систем у дітей з соматотропною недостатністю. Встановлено, що лікування препаратами гормону росту потребує постійного моніторингу стану цих систем для своєчасного виявлення вторинного гіпотиреозу, вторинного гіпокортицизму і корекції виявлених порушень.

Діти, хворі на соматотропну недостатність (СН), потребують довготривалої (кілька років) терапії препаратами рекомбінантного гормону росту (рГР). За останні десятиріччя накопичений значний досвід у лікуванні таких хворих, розроблені високоякісні препарати рГР, розширені показання для призначення рГР у клінічній практиці, зростає кількість пацієнтів, які отримують терапію рГР протягом багатьох років. Відповідно виникає потреба у визначенні не тільки ефективності препаратів рГР, а також їх безпечності та впливу на інші органи і системи організму, зокрема на стан гіпофізарно-тиреоїдної та гіпофізарно-наднирковозалозної систем [1–4]. Вважають, що замісна терапія рГР може обумовити розвиток порушень роботи цих систем, включаючи зниження рівня вільного тироксину (fT4) у поєднанні зі зниженням рівня тиреотропного гормону (ТТГ), а також зменшувати біодоступність кортизолу через посилення конверсії активного кортизолу до неактивного кортизолу [5–8]. Крім того, при застосуванні рГР знижується концентрація загального кортизолу в сироватці крові через зменшення рівня циркулюючого кортизонзв'язуючого глобуліну. На тлі терапії рГР не виключена також маніфестація дефіциту адренкортикотропного гормону (АКТГ) [9–12]. Замісна терапія рГР у дітей з гіпопітуїтаризмом демаскує вторинний гіпотиреоз та вторинний гіпокортицизм, у результаті чого знижується якість життя пацієнтів і вони потребують призначення замісної терапії L-тироксином і гідрокортизоном [3, 13, 14]. Також ці діти мають підвищений ризик розвитку клінічних і лабораторних проявів гіпотиреозу.

© О. А. Вишневська, О. В. Большова, М. Д. Тронько, 2013

реозу і гіпокортицизму, що обумовлює необхідність моніторингу функції щитоподібної та надниркових залоз.

Мета дослідження — оцінити стан гіпофізарно-тиреоїдної і гіпофізарно-наднирковозалозної систем у дітей із соматотропною недостатністю допубертатного віку на тлі замісної терапії препаратами рГР протягом одного року лікування.

У відділенні дитячої ендокринної патології ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В. П. Комісаренка НАМН України” обстежено 57 пацієнтів (31 хлопчик і 26 дівчат) у віці від 3,2 до 11,5 року (у середньому $8,04 \pm 1,75$ року). Зріст дітей на момент обстеження становив від 78,0 до 122,5 см (у середньому $104,8 \pm 1,57$ см), маса тіла — від 10,0 до 34,6 кг (у середньому $17,94 \pm 0,68$ кг). Стандартне відхилення (SD) росту становило від $-2,6$ до $-6,9$ (у середньому $-4,35 \pm 0,25$). Рентгенологічний вік дітей, визначений за атласом W. W. Greulich, S. P. Pyle, до початку лікування становив від 0,9 до 8,0 років (у середньому $4,35 \pm 0,25$ року).

Основною скаргою при зверненні до лікаря було відставання у зрості, яке у більшості пацієнтів проявилось після 3 років, а у деяких — вже після року життя. Також пацієнти скаржилися на підвищену втомлюваність, слабкість, схильність до закресів, головний біль. У всіх хворих відмічалось зниження швидкості росту до 1–2 см за рік. Із анамнезу встановлено відсутність спадковості за ендокринними захворюваннями. Проведення МРТ виключило наявність пухлин головного мозку.

Діагноз СН був підтверджений двома діагностичними тестами з інсуліном та клонідином. У 30 хворих (1-ша група) спостерігався ізольований дефіцит ГР, у 27 пацієнтів (2-га група) — множинний дефіцит гормонів аденогіпофіза. Стимульований викид ГР при проведенні проби з інсуліном становив від 0,07 до 7,0 нг/мл (у середньому $1,2 \pm 0,21$ нг/мл), з клонідином — від 0,1 до 6,6 нг/мл (у середньому $1,78 \pm 0,2$ нг/мл). Середній рівень інсуліноподібного фактору росту-1 (ІФР-1) у крові був значно знижений у всіх хворих і становив $24,48 \pm 2,55$ нг/мл до початку лікування ($p < 0,001$ відносно контролю). Рівень ІФР-1 у пацієнтів контрольної групи становив $234,98 \pm 8,93$ нг/мл.

Усі хворі з дефіцитом ГР отримували терапію препаратами рГР. Доза рГР при соматотропній недостатності у дітей становила 0,033 мг/кг на добу. Обстеження проводили до та через 6 і 12 міс. після початку лікування.

Збільшення в рості за рік становило $8,95 \pm 0,27$ см. Хворим з вторинним гіпотиреозом призначали L-тироксин у розрахунку 2–2,5 мкг/кг на добу натще щоденно під контролем за рівнем fT4.

Пацієнтам з СН, у яких на тлі лікування рГР відбувалося зменшення рівня кортизолу нижче 215,0 нмоль/л та з'являлися клінічні симптоми гіпокортицизму, проводили тест з АКТГ (сінактен). У разі відсутності підвищення рівня кортизолу вдвічі після стимуляції АКТГ хворим призначали терапію гідрокортизоном (рег ос) у підтримуючій дозі ($8\text{--}10$ мг/м²). Лікування продовжували протягом терапії рГР.

Отримані результати оброблені методами варіаційної статистики. Вірогідність оцінювали за критерієм Стьюдента і констатували при рівні $p < 0,05$.

Аналіз рівня ТТГ у крові хворих до початку лікування рГР виявив значний діапазон індивідуальних показників — від низьких до нормальних і підвищених значень. Середній рівень ТТГ у пацієнтів з ізольованим дефіцитом ГР становив $2,87 \pm 0,26$ мОД/л при нормі 0,25–3,5 мОД/л. Середній рівень fT4 у дітей 1-ї групи дорівнював $14,2 \pm 0,59$ пмоль/л при нормі 9,0–20,0 пмоль/л. У пацієнтів 2-ї групи класично низький рівень ТТГ ($<0,1$ мОД/л) мали 6 пацієнтів (22,22%) — у середньому $0,21 \pm 0,07$ мОД/л, у більшості пацієнтів — 16

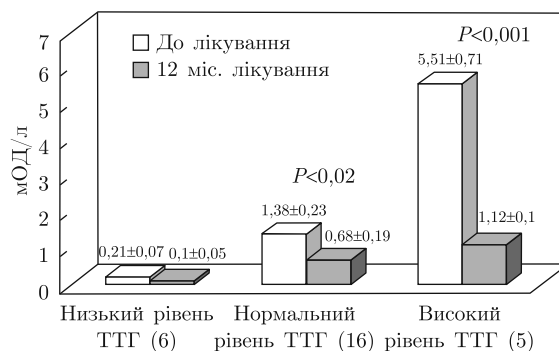


Рис. 1. Динаміка рівня ТТГ протягом лікування рГР у пацієнтів з множинним дефіцитом гормонів гіпофіза

(59,26%) — базальна концентрація ТТГ знаходилась у межах нормальних значень і в середньому становила $1,38 \pm 0,23$ мОД/л, а у 5 пацієнтів (18,52%) рівень ТТГ був підвищений ($5,51 \pm 0,71$ мОД/л). Рівень fT4 до початку лікування в 2-й групі у пацієнтів зі зниженим рівнем ТТГ був низьким — $7,8 \pm 0,53$ пмоль/л, у пацієнтів з нормальними значеннями ТТГ він був на межі норми — $8,6 \pm 0,38$ пмоль/л, у пацієнтів з підвищеним ТТГ становив $7,3 \pm 0,67$ пмоль/л. Пацієнти 2-ї групи отримували замісну терапію L-тироксином у стабільній дозі (з розрахунку 2,0–2,5 мкг/кг на добу) до початку лікування рГР. Через 1 рік на тлі лікування рГР рівень ТТГ у хворих 1-ї групи становив $2,69 \pm 0,15$ мОД/л, рівень fT4 у 24 пацієнтів вірогідно знизився — $12,27 \pm 0,38$ пмоль/л ($p < 0,01$), у 6 пацієнтів був нижче норми — $7,9 \pm 0,64$ пмоль/л. Цим хворим була призначена терапія L-тироксином. У хворих 2-ї групи, які отримували замісну терапію L-тироксином і препаратами рГР, через 1 рік лікування спостерігалось вірогідне зниження рівня ТТГ. У пацієнтів з нормальним рівнем ТТГ до початку лікування він знизився в середньому до $0,68 \pm 0,19$ мОД/л ($p < 0,02$), у пацієнтів з підвищеним рівнем — до $1,12 \pm 0,1$ мОД/л ($p < 0,001$), у пацієнтів з низьким рівнем залишився низьким — $0,1 \pm 0,05$ мОД/л (рис. 1).

Таким чином, через рік терапії препаратами рГР замісну терапію L-тироксином отримували 33 пацієнта (57,89%). Контроль замісної тиреоїдної терапії здійснювали за рівнем fT4 кожні 3 міс. У 3 пацієнтів доза L-тироксину збільшилась протягом лікування рГР з 25 до 75 мкг на добу, у 10 пацієнтів — з 25 до 50 мкг на добу, у 9 — з 50 до 75 мкг на добу, у 4 — з 50 до 100 мкг на добу, у 1 пацієнта — з 75 до 100 мкг на добу. 6 пацієнтів отримували стабільну дозу L-тироксину протягом лікування рГР.

Референтні значення вмісту кортизолу в крові становили 215–606 нмоль/л. У групі контролю середній вміст кортизолу становив $356,59 \pm 11,47$ нмоль/л. У цілому по групі (57 хворих) середній вміст кортизолу в крові дорівнював $286,96 \pm 11,8$ нмоль/л, що знаходилось у межах референтних значень, але було достовірно нижче, ніж у групі контролю ($p < 0,001$). У більшості хворих (44 особи, 78,2%) рівень кортизолу в крові був нормальний ($321,15 \pm 11,0$ нмоль/л).

Проте при визначенні рівня кортизолу в сироватці крові встановлено зниження ($191,15 \pm 8,65$ нмоль/л) цього показника у 13 з 57 пацієнтів (22,8%) відносно референтних значень, і при порівнянні з показниками вмісту кортизолу в інших 44 хворих виявлено його достовірне зниження ($p < 0,001$).

У 5 пацієнтів з 57 (8,7%) встановлено ознаки гіпокортицизму до початку лікування рГР. Клінічними проявами недостатності надниркових залоз були: підвищена загальна слабкість,

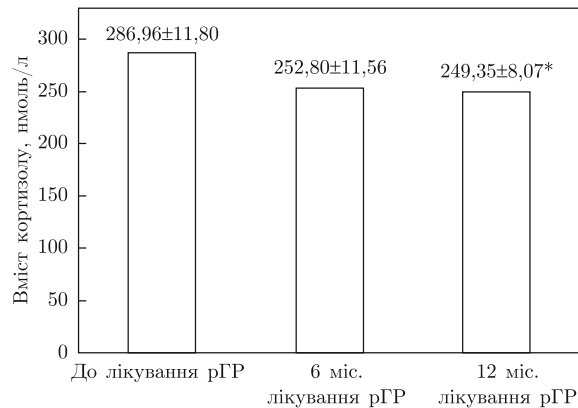


Рис. 2. Динаміка вмісту кортизолу протягом лікування препаратами рГР у 57 хворих.

* $p < 0,01$ — вірогідна різниця з показниками до лікування рГР

втомлюваність, зниження артеріального тиску. Гіпокортицизм визначався за рівнем базального (0 хв) і стимульованого (60 хв) кортизолу при проведенні тесту з інсуліном, а також при проведенні проби з АКТГ (сінакеном). При отриманні позитивного результату проби гіпокортицизм визначався як вторинний, негативного — як первинний. Рівень кортизолу у цих 5 пацієнтів до проби становив $148,8 \pm 17,16$ нмоль/л, після проведення проби з сінакеном — $193,4 \pm 23,39$ нмоль/л, тобто не відбувалося збільшення вмісту кортизолу вдвічі, або до рівня 550,00 нмоль/л, що трактувалося нами як первинний гіпокортицизм, а хворі потребували замісної терапії глюкокортикоїдами. У цьому випадку хворим призначали терапію гідрокортизоном (рег ос) у підтримуючій дозі (8–10 мг/м² на добу).

Інші 8 з 13 хворих, які мали низький вміст кортизолу в крові до початку лікування, не отримували замісної терапії; у них був діагностований вторинний гіпокортицизм (тобто викид кортизолу при проведенні проби з сінакеном збільшувався вдвічі).

Контроль клінічного стану хворих на СН та визначення вмісту рівня кортизолу в сироватці крові проводили у всіх хворих незалежно від рівня кортизолу до початку лікування кожні 3 міс.

Через 6 міс. лікування середній рівень кортизолу в крові у 57 пацієнтів, які отримували постійне лікування рГР, становив $252,8 \pm 11,56$ нмоль/л. При аналізі індивідуальних показників виявлено, що у 10 хворих вміст кортизолу був нижче референтних значень і становив $137,5 \pm 8,44$ нмоль/л. У цю групу (10 хворих) увійшли 8 пацієнтів, які мали низький вміст кортизолу до початку лікування, і 2 нових пацієнтів, які попередньо мали задовільний вміст кортизолу в крові. У цій групі хворих проводився тест з АКТГ. Підвищення рівня кортизолу при проведенні проби становило $187,5 \pm 11,25$ нмоль/л, що трактувалося як негативний результат. Всім цим хворим була призначена замісна терапія глюкокортикоїдами. Тобто через 6 міс. спостереження 15 хворих вже отримували не тільки терапію рГР, а й гідрокортизоном.

Через 1 рік лікування рГР середні значення кортизолу в цілому по групі знизилось і становило $249,35 \pm 8,07$ нмоль/л, $p < 0,01$ відносно такого до початку лікування. Зниження середнього вмісту кортизолу в 57 хворих на тлі терапії препаратами рГР протягом 1 року проілюстровано на рис. 2.

Індивідуальний аналіз виявив ще 4 хворих із вмістом кортизолу нижче референтних значень. Так само їм була проведена проба з АКТГ, яка підтвердила первинний гіпокорти-

Таблиця 1. Кількість хворих із нормальним і зниженим рівнем кортизолу перед початком та на тлі лікування препаратами рГР

| Термін лікування | Хворі з нормальним рівнем кортизолу | Хворі зі зниженим рівнем кортизолу | Всього | Хворі зі зниженим рівнем кортизолу, % |
|------------------|-------------------------------------|------------------------------------|--------|---------------------------------------|
| Перед початком | 44 | 13 | 57 | 22,8 |
| 6 міс. | 42 | 15 | 57 | 26,3 |
| 12 міс. | 38 | 19 | 57 | 33,33 |

Таблиця 2. Кількість хворих на соматотропну недостатність та гіпокортицизм, які отримували замісну терапію глюкокортикоїдами (ЗТГ)

| Термін лікування рГР | Всього | ЗТГ | Без ЗТГ |
|----------------------|--------|-----|---------|
| Перед початком | 13 | 5 | 8 |
| 6 міс. | 15 | 15 | — |
| 12 міс. | 19 | 19 | — |

цизм. Цим 4 хворим була призначена замісна терапія глюкокортикоїдами. Кількість хворих, в яких на тлі лікування рГР визначалось зниження вмісту кортизолу і яким була призначена замісна терапія глюкокортикоїдами, наведено в табл. 1, 2.

Таким чином, у пацієнтів з центральним гіпотиреозом, внаслідок гіпопітуїтаризму, рівень ТТГ може залишатися в межах нормальних значень здорових дітей. Для виявлення гіпотиреозу у дітей із СН необхідно визначати рівень ТТГ та fT4.

За даними оцінки середньої добової дози L-тироксину для компенсації вторинного гіпотиреозу встановлено необхідність поступового збільшення добової дози препарату на тлі замісної терапії рГР у більшості хворих (27 пацієнтів (81,82%) із 33). Для призначення адекватної дози L-тироксину на тлі терапії рГР необхідно проводити постійний моніторинг стану гіпофізарно-тиреоїдної системи пацієнтів (визначення рівня ТТГ та fT4 у крові кожні 3 міс). Підтверджено наявність збереження механізму регуляції секреції ТТГ за принципом негативного зворотного зв'язку (зниження рівня ТТГ при призначенні препаратів L-тироксину) у хворих на СН допубертатного віку.

При детальному аналізі стану системи гіпофіз — надниркові залози виявлено, що певна кількість хворих (13 з 57) мала надниркову недостатність ще до початку терапії гормоном росту. Можливо, клінічні ознаки СН маскували прояви гіпокортицизму, тим більш що більшість цих пацієнтів (8) не потребувала замісної терапії глюкокортикоїдами на початку лікування препаратами рГР. На тлі тривалої терапії препаратами рГР у цих 8 хворих прояви гіпокортицизму посилювалися і подальше зниження вмісту кортизолу вимагало призначення препаратів глюкокортикоїдів. Крім того, на тлі лікування препаратами рГР протягом 1 року рівень кортизолу знизився у 6 (13,63%) із 44 хворих, у яких був встановлений первинний гіпокортицизм, що також потребувало призначення замісної глюкокортикоїдної терапії.

Протокол спостереження за хворими на СН, які отримують лікування рГР, повинен включати контроль стану надниркових залоз 1 раз на 3 міс. Хворі на СН належать до групи ризику по розвитку гострої недостатності надниркових залоз у стресових ситуаціях.

1. *Monson, S. P.* Long term experience with GH-replacement therapy: efficacy and safety // *Eur. J. Endocrinol.* – 2003. – **148**. – P. 9–14.
2. *Grossman A. B.* The diagnosis and management of central hypoadrenalism // *J. Clin. Endocrinol.* – 2010. – **95**, No 11. – P. 48–55.

3. *Giavoli C., Bergamaschi S., Ferrante E. et al.* Effect of growth hormone deficiency and recombinant hGH (rhGH) replacement on the hypothalamic-pituitary-adrenal axis in children with idiopathic isolated GH deficiency // *J. Clin. Endocrinol. (Oxf)*. – 2008. – **68**, No 2. – P. 247–251.
4. *Stratakis C. A., Rusovici D. E., Kulin H. E., Finkelstein J. W.* Dysregulation of the hypothalamic-pituitary-adrenal axis in short children with and without growth hormone deficiency // *J. Pediatr. Endocrinol. Metab.* – 2000. – **13**, No 8. – P. 1095–1100.
5. *Bowlby D. A., Rapaport R.* Safety and efficacy of growth hormone therapy in childhood // *Pediatr. Endocrinol. Rev.* – 2004. – **2**, No 1. – P. 68–77.
6. *Kalina-Faska B., Kalina M., Koehler B.* Effects of recombinant growth hormone therapy on thyroid hormone concentrations // *J. Clin. Pharmacol. Ther.* – 2004. – **42**, No 1. – P. 30–34.
7. *Behan L. A., Monson J. P., Agha A.* The interaction between growth hormone and the thyroid axis in hypopituitary patient // *J. Clin. Endocrinol. (Oxf)*. – 2011. – **74**, No 3. – P. 281–288.
8. *Di Iorgi N., Napoli F., Allegri A. et al.* The accuracy of the glucagon test compared to the insulin tolerance test in the diagnosis of adrenal insufficiency in young children with growth hormone deficiency // *J. Clin. Endocrinol. Metab.* – 2010. – **95**, No 5. – P. 2132–2139.
9. *Finkelstein J. W., Rusovici D. E., Green E. et al.* Children with organic growth hormone deficiency have elevated cortisol responses to stimuli // *J. Clin. Endocrinol. Metab.* – 2001. – **86**, No 6. – P. 2854–2856.
10. *Agha A., Walker D., Perry L. et al.* Unmasking of central hypothyroidism following growth hormone replacement in adult hypopituitary patients // *J. Clin. Endocrinol. (Oxf)*. – 2007. – **66**, No 1. – P. 72–77.
11. *Festen D. A., Visser T. J., Otten B. J. et al.* Thyroid hormone levels in children with Prader-Willi syndrome before and during growth hormone treatment // *J. Clin. Endocrinol. (Oxf)*. – 2007. – **67**, No 3. – P. 449–456.
12. *Schmid C., Zwimpfer C., Brändle M. et al.* Effect of thyroxine replacement on serum IGF-I, IGFBP-3 and the acid-labile subunit in patients with hypothyroidism and hypopituitarism // *J. Clin. Endocrinol. (Oxf)*. – 2006. – **65**, No 6. – P. 706–711.
13. *Martins M. R. A., Doin F. C., Komatsu W. R. et al.* Growth Hormone Replacement Improves Thyroxine Biological Effects: Implications for Management of Central Hypothyroidism // *J. Clin. Endocrinol. Metab.* – 2007. – **92**. – P. 4144–4153.
14. *Seminara S., Stagi S., Candura L. et al.* Changes of thyroid function during long-term hGH therapy in GHD children. A possible relationship with catch-up growth? // *Horm. Metab. Res.* – 2005. – **37**, No 12. – P. 751–756.

ДУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В. П. Комісаренка НАМН України”, Київ

Надійшло до редакції 26.02.2013

О. А. Вишнева, Е. В. Большова,
член-корреспондент НАН України **Н. Д. Тронько**

Влияние заместительной терапии препаратами рекомбинантного гормона роста на состояние гипофизарно-тиреоидной и гипофизарно-надпочечниковой систем у детей препубертатного возраста с соматотропной недостаточностью

В отделении детской эндокринной патологии ГУ “Інститут ендокринології та обміну речовин ім. В. П. Комісаренко НАМН України” изучено влияние длительной терапии препаратами рГР на состояние гипофизарно-тиреоидной и гипофизарно-надпочечниковой систем у детей с соматотропной недостаточностью. Установлено, что лечение препаратами гормона роста требует постоянного мониторинга состояния этих систем для своевременного выявления вторичного гипотиреоза, вторичного гипокортицизма и коррекции выявленных нарушений.

O. A. Vyshnevskaya, E. V. Bolshova,
Corresponding Member of the NAS of Ukraine **M. D. Tronko**

Influence of replacement growth hormone therapy on pituitary-thyroid and pituitary-adrenal systems in prepubertal children with GH deficiency

At the Department of pediatric endocrinology of V. P. Komisarenko Institute of Endocrinology and Metabolism of the NAMS of Ukraine, the influence of long-term GH therapy on pituitary-thyroid and pituitary-adrenal systems in children with GH deficiency is studied. During the long-term GH therapy, the necessity to monitor the state of these systems and to correct revealed disturbances is established.

О. В. Шеметун

Модифікація радіаційно-індукованого цитогенетичного ефекту в лімфоцитах периферичної крові людини з використанням антиоксидантного вітамінного препарату

(Представлено академіком НАН України Д. М. Гродзинським)

*Досліджено цитогенетичний ефект в опромінених *in vitro* в дозі 1 Гр лімфоцитах периферичної крові людини при окремому культивуванні та при дії антиоксидантного вітамінного препарату “Веторон” (містить вітаміни А, Е, С) в концентрації 40 мкг/мл. Встановлено, що застосування антиоксидантного вітамінного препарату перед опроміненням крові забезпечує зниження радіаційно-індукованої частоти аберацій хромосом в середньому на 49,55%.*

Широке використання атомної енергії може призвести до додаткового опромінення людини, особливо в аварійних ситуаціях, насамперед персоналу, зайнятого у відповідних технологічних циклах, і населення, яке проживає на забруднених радіонуклідами територіях. Тому дослідниками проводиться активна експериментальна робота з пошуку, випробування та впровадження засобів, що мають радіопротекторні властивості. При цьому велика увага приділяється вивченню антиоксидантів [1, 2]. Вітаміни, що належать до природних антиоксидантів (токоферол, ретинол і каротиноїди, аскорбінова кислота), сприяють нейтралізації вільних радикалів і припиненню ланцюгових реакцій пероксидного окиснення в тканинах, захищаючи клітини при дії іонізуючої радіації [3].

Метою дослідження було встановлення частоти всіх типів аберацій хромосом в опромінених *in vitro* лімфоцитах периферичної крові людини при дії антиоксидантного вітамінного препарату в концентрації, що модифікує радіаційно-індукований цитогенетичний ефект і має радіопротекторні властивості.

При виконанні роботи використовували антиоксидантний препарат “Веторон” (Росія), що містить водорозчинні форми вітамінів Е (токоферолу) і С (аскорбінової кислоти) у концентрації 40 мг/мл та А (ретинолу) у концентрації 20 мг/мл. “Веторон” застосовували в концентрації 40 мкг/мл, яка за результатами попереднього пошукового експерименту не справляла токсичного впливу на культуру лімфоцитів периферичної крові людини і виявляла найкращий антиоксидантний ефект при опроміненні цільної крові *in vitro* [4, 5].

Опромінення крові в дозі 1 Гр проводили на установці РУМ-17 (напруга 200 кВ, сила струму 10 мА, фільтри Cu 0,5 мм + Al 1 мм, фокусна відстань 50 см, потужність дози 0,415 Гр/хв).

Матеріалом цитогенетичного дослідження були лімфоцити периферичної крові 10 умовно здорових волонтерів середнього віку. Дослідження виконували за загальноприйнятим напівмікрометодом [6]. Диференційне G-забарвлення метафазних хромосом проводили з використанням трипсину [6]. Аналіз здійснювали під мікроскопами зі збільшенням $\times 1000$. Реєстрували всі аберації хроматидного і хромосомного типів. Пошкоджені хромосоми та

точки розривів аналізували згідно з міжнародною номенклатурою ISCN-2005 [7]. Загалом проаналізовано 6251 G-диференційно забарвлених метафаз: 2629 неопромінених клітин для встановлення умовно контрольного рівня аберацій хромосом, 1521 клітину при опроміненні крові *in vitro* в дозі 1 Гр та 2101 клітину з додаванням перед опроміненням крові препарату “Веторон”. Отримані дані опрацьовували з використанням методу порівняння середніх величин за Стьюдентом–Фішером [8].

Цитогенетичний аналіз показав, що середній рівень аберацій хромосом у лімфоцитах периферичної крові обстежених осіб становив $1,90 \pm 0,27$ на 100 клітин (табл. 1), що відповідає популяційному рівню пошкоджень хромосом [9].

При опроміненні крові *in vitro* в дозі 1 Гр середня частота абераційних клітин становила $(21,30 \pm 1,05)\%$. Зареєстровано клітини з двома пошкодженнями хромосом, внаслідок чого рівень аберацій хромосом становив $24,19 \pm 1,10$ на 100 клітин і статистично достовірно перевищував показники неопроміненого контролю ($p < 0,001$).

Варто зазначити, що рівень радіаційно-індукованих аберацій у нашому дослідженні узгоджувався з оптимальною частотою пошкоджень (близько 20%), рекомендованою для експериментального виявлення хімічних модифікаторів мутагенезу [10], що підтверджує правильність величини дози опромінення, вибраної для проведення досліджень.

Застосування перед опроміненням крові антиоксидантного препарату “Веторон” у дозі 40 мкг/мл спричинило статистично значуще зниження середнього рівня аберацій хромосом до $12,23 \pm 0,71$ на 100 метафаз ($p < 0,001$), що свідчить про антиоксидантні властивості препарату і на підставі чого його можна віднести до антимуагенів “середньої” ефективності, для яких притаманно зменшення частоти аберацій на 40,1–80% [11].

Отримані нами результати зіставні з даними М. Копораска, згідно з якими вітаміни С і Е (“Sigma”) при окремому використанні можуть спричиняти антиоксидантний ефект в культурі опромінених лімфоцитів крові людини при додаванні *in vitro* у концентрації 10 мкг/мл [12].

Аналіз спектра зареєстрованих пошкоджень хромосом показав, що при дії випромінювання аберації хроматидного типу були представлені хроматидними розривами і обмінами з середньою частотою $2,56 \pm 0,41$ на 100 метафаз, яка перевищувала відповідний показник у контролі ($p < 0,05$) (табл. 2).

При застосуванні препарату “Веторон” хроматидних обмінів не зареєстровано, а частота хроматидних розривів знизилась до $0,95 \pm 0,21$ на 100 метафаз і не мала різниці з неопроміненим контролем ($p > 0,05$). Беручи до уваги те, що індукція аберацій хроматидного типу не притаманна для дії іонізуючого випромінювання в нестимульованих лімфоцитах людини і є характерною ознакою хромосомної нестабільності, ми вважаємо, що зареєстрована в дослідженні підвищена частота хроматидних пошкоджень може бути спричинена індукцією

Таблиця 1. Основні цитогенетичні показники в опромінених *in vitro* лімфоцитах периферичної крові при окремому культивуванні та дії антиоксидантного препарату “Веторон”

| Варіант дослідю | Частота абераційних клітин, % | Рівень аберацій хромосом, на 100 клітин | |
|------------------------------------------|-------------------------------|-----------------------------------------|----------------------------|
| | | середній | мінімальний — максимальний |
| Контроль | $1,90 \pm 0,27$ | $1,90 \pm 0,27$ | 0,96–3,50 |
| Опромінення, 1 Гр | $21,30 \pm 1,05$ | $24,19 \pm 1,10$ | 17,60–31,30 |
| “Веторон”, 40 мкг/мл + опромінення, 1 Гр | $11,19 \pm 0,69$ | $12,23 \pm 0,71$ | 9,69–15,12 |

bystander effect (вторинними змінами в неопромінених клітинах) [13], а її зниження при додаванні антиоксидантного препарату свідчить про визначальну роль оксидативного стресу в механізмі розвитку радіаційно-індукованого ефекту свідка.

Переважну більшість (89%) серед зареєстрованих пошкоджень в опромінених лімфоцитах становили аберації хромосомного типу, що характерно для впливу іонізуючої радіації в G₀ стадії клітинного циклу [14]. Застосування “Веторону” спричинило статистично достовірне зниження індукованих іонізуючим випромінюванням пошкоджень хромосомного типу до рівня $11,28 \pm 0,69$ на 100 метафаз зі ступенем достовірності $p < 0,001$ (табл. 3). Проте навіть після використання антиоксидантного препарату рівень аберацій хромосомного типу в опромінених лімфоцитах статистично вірогідно перевищував контрольний показник ($p < 0,001$).

Радіаційно-індукований рівень делецій хромосом становив $7,82 \pm 0,69$ на 100 метафаз (див. табл. 3). Застосування “Веторону” сприяло зниженню частоти делецій до $4,66 \pm 0,46$ на 100 клітин ($p < 0,05$).

Частота асиметричних хромосомних обмінів (дицентричних та центричних кільцевих хромосом), які є нестабільними маркерами дії радіації, при опроміненні перевищувала контрольний рівень і становила $8,42 \pm 0,71$ на 100 метафаз. Використання антиоксиданту забезпечило статистично достовірне зниження частоти асиметричних хромосомних обмінів до $3,62 \pm 0,41$ на 100 метафаз ($p < 0,001$).

Частота симетричних хромосомних обмінів (транслокацій та інверсій) в опромінених *in vitro* в дозі 1 Гр лімфоцитах периферичної крові становила $5,39 \pm 0,58$ на 100 клітин. При застосуванні антиоксидантного препарату встановлено статистично вірогідне її зниження ($p < 0,02$), що підтверджує радіопротекторні властивості “Веторону”.

Аналіз індивідуальних цитогенетичних показників волонтерів виявив різну радіочутливість лімфоцитів периферичної крові окремих осіб до опромінення у високій дозі. Радіаційно-індуковані частоти аберацій хромосом були максимальними в культурах лімфоцитів № 4 і № 6, а мінімальними — в культурах № 5 і № 8 (табл. 4).

Таблиця 2. Частота аберацій хроматидного типу в опромінених *in vitro* лімфоцитах периферичної крові при окремому культивуванні та дії антиоксидантного препарату “Веторон”

| Варіант досліджу | Частота аберацій, на 100 клітин | | |
|------------------------------------------|---------------------------------|---------------------|-----------------|
| | хроматидних розривів | хроматидних обмінів | всього |
| Контроль | $0,80 \pm 0,17$ | $0,00 \pm 0,00$ | $0,80 \pm 0,17$ |
| Опромінення, 1 Гр | $2,43 \pm 0,40$ | $0,13 \pm 0,09$ | $2,56 \pm 0,41$ |
| “Веторон”, 40 мкг/мл + опромінення, 1 Гр | $0,95 \pm 0,21$ | $0,00 \pm 0,00$ | $0,95 \pm 0,21$ |

Таблиця 3. Частота аберацій хромосомного типу в опромінених *in vitro* лімфоцитах периферичної крові при окремому культивуванні та дії антиоксидантного препарату “Веторон”

| Варіант досліджу | Частота аберацій хромосом, на 100 клітин | | | |
|------------------------------------------|------------------------------------------|-------------------------|----------------------------------|------------------|
| | делецій | транслокацій і інверсій | дицентриків і кільцевих хромосом | всього |
| Контроль | $0,84 \pm 0,18$ | $0,19 \pm 0,08$ | $0,08 \pm 0,05$ | $1,10 \pm 0,20$ |
| Опромінення, 1 Гр | $7,82 \pm 0,69$ | $5,39 \pm 0,58$ | $8,42 \pm 0,71$ | $21,63 \pm 1,06$ |
| “Веторон”, 40 мкг/мл + опромінення, 1 Гр | $4,66 \pm 0,46$ | $3,00 \pm 0,37$ | $3,62 \pm 0,41$ | $11,28 \pm 0,69$ |

Таблиця 4. Індивідуальні частоти аберацій хромосом у обстежених волонтерів при окремому культивуванні опромінених *in vitro* лімфоцитів периферичної крові та попередній дії антиоксидантного препарату “Веторон”

| Культура лімфоцитів, № п/п | Частота аберацій хромосом, на 100 клітин | | | Зниження радіаційно-індукованої частоти аберацій, % |
|----------------------------|------------------------------------------|-------------------|------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| | Контроль | Опромінення, 1 Гр | “Веторон”, 40 мкг/мл + опромінення, 1 Гр | |
| 1 | 0,96 | 24,50 | 10,66 | 56,49 |
| 2 | 2,05 | 26,00 | 12,09 | 53,56 |
| 3 | 1,00 | 24,14 | 12,50 | 48,22 |
| 4 | 3,00 | 28,76 | 13,62 | 52,64 |
| 5 | 1,07 | 17,60 | 9,69 | 44,94 |
| 6 | 3,50 | 31,30 | 15,12 | 51,69 |
| 7 | 2,00 | 25,81 | 13,37 | 48,20 |
| 8 | 2,00 | 18,79 | 10,22 | 45,61 |
| 9 | 2,70 | 24,26 | 13,03 | 46,29 |
| 10 | 2,00 | 21,52 | 12,30 | 42,84 |

Обстежені особи по-різному реагували на введення в кров перед її опроміненням антиоксидантного препарату. Якщо в середньому по групі після введення “Веторону” радіаційно-індукована частота аберацій хромосом знижувалась на 49,55%, то в культурі лімфоцитів № 1 цей показник становив 56,49%, а в культурі № 10 — 42,84%.

Таким чином, у результаті проведених досліджень встановлено частоту абераційних клітин, рівень та спектр аберацій хромосом в опромінених *in vitro* в дозі 1 Гр лімфоцитах периферичної крові умовно здорових осіб при окремому культивуванні та з попереднім застосуванням антиоксидантного препарату “Веторон” в концентрації 40 мкг/мл. Показано, що застосування “Веторону” в концентрації 40 мкг/мл забезпечує статистично достовірне зниження рівнів усіх типів аберацій хромосом, порівняно з радіаційно-індукованим, та зменшення середньої частоти аберацій на 49,55%, на підставі чого його можна віднести до антимутагенів “середньої” ефективності.

У перспективі досліджень — застосування антиоксидантного препарату для модифікації радіаційно-індукованого ефекту свідка в лімфоцитах крові людини, що дасть можливість встановити роль оксидативного стресу в механізмі розвитку цього феномену.

1. Горовой Л. Ф., Сенюк О. Ф. Комплексная защита от последствий хронического облучения малыми дозами // Материалы конф. “Острые проблемы разработки противолучевых средств: консерватизм или модернизация”, 13–14 ноября 2012 г. – Москва, 2012. – С. 14.
2. Тарумов Р. А., Башарин В. А., Антушевнич А. А. и др. Современные антиоксиданты как перспективные средства профилактики и лечения радиационных поражений // Там же. – Москва, 2012. – С. 20.
3. Клебанов Г. И. Антиоксиданты. Антиоксидантная активность. Методы исследования 2010. – [Electronic resource]. – Mode of access: <http://www.gastroportal.ru/php/content.php?id=1289>.
4. Шеметун О. В., Талан О. О., Педан Л. Р. Вплив антиоксидантного препарату на частоту аберацій хромосом у лімфоцитах людини // Актуальні проблеми акушерства і гінекології, клін. імунології та мед. генетики. – 2012. – Вип. 23. – С. 433–439.
5. Шеметун О. В. Цитогенетичні показники в опромінених *in vitro* соматичних клітинах людини при дії антиоксидантного вітамінного препарату // Архів клін. та експерим. медицини. – 2012. – 21, № 2. – С. 204–206.
6. Цитогенетичні методи дослідження хромосом людини: Методичні рекомендації / КМАПО МОЗ України. – Київ, 2003. – 23 с.
7. An International system for human cytogenetic nomenclature: high-resolution banding / Standing committee on Human Cytogenetic nomenclature. – Basel: Karger, 2005. – 130 p.
8. Атраментова Л. А., Утевская О. М. Статистические методы в биологии. – Горловка: Лихтар, 2008. – 248 с.

9. *Талан О. О.* Цитогенетичні показники при спонтанному та радіаційно-індукованому соматичному хромосомному мутагенезі в осіб різного віку: Автореф. дис. ... канд. біол. наук: 03.00.15. – Київ, 2012. – 20 с.
10. *Методические* рекомендации по экспериментальному выявлению химических модификаторов мутагенеза и канцерогенеза / Научно-исследовательский институт общей и коммунальной гигиены им. А. Н. Сысина. – Москва, 1986. – 10 с.
11. *Семенов В. В., Студенцова И. А.* Количественные и качественные критерии оценки эффективности антимутагенов в эксперименте // Вестн. РАМН. – 1998. – № 3. – С. 16–20.
12. *Копораска М.* The influence of antioxidant vitamins on the radiation-induced bystander effect in normal human lymphocytes // Сучасні проблеми радіаційних досліджень. XXXV щорічна конф. Європейського т-ва з радіаційних досліджень: Зб. матеріалів. – Київ, 2007. – С. 94–101.
13. *Шеметун О. В.* Результаты ретроспективного цитогенетического обстеження учасників ліквідації наслідків аварії на ЧАЕС, опромінених у високих дозах // Актуальні проблеми акушерства і гінекології, клін. імунології та мед. генетики. – 2011. – Вип. 22. – С. 343–351.
14. *Демина Э. А., Пилинская М. А., Петунин Ю. И., Клошин Д. А.* Радиационная цитогенетика: русско-английский словарь-справочник. – Киев: Здоровье, 2009. – 368 с.

ДУ “Національний науковий
центр радіаційної медицини НАМН України”, Київ

Надійшло до редакції 21.02.2013

Е. В. Шеметун

Модификация радиационно-индуцированного цитогенетического эффекта в лимфоцитах периферической крови человека с использованием антиоксидантного витаминного препарата

Исследован цитогенетический эффект в облученных in vitro в дозе 1 Гр лимфоцитах периферической крови человека при отдельном культивировании и при действии антиоксидантного витаминного препарата “Веторон” (содержит витамины А, Е, С) в концентрации 40 мкг/мл. Установлено, что применение антиоксидантного витаминного препарата перед облучением крови обеспечивает снижение радиационно-индуцированной частоты aberrаций хромосом в среднем на 49,55%.

O. V. Shemetun

Modification of radiation-induced cytogenetic effects in human peripheral blood lymphocytes using antioxidant vitaminic medicinal product

The results of investigation of the radioinduced cytogenetic effect in human peripheral blood lymphocytes irradiated in vitro in a dose of 1 Gy under both the separate cultivation and the action of antioxidant “Vetoron” (containing vitamins A, E, C) at a concentration of 40 mg/ml are presented. It is shown that the application of “Vetoron” before the radiation exposure of blood reduced the frequency of radiation-induced chromosomal aberrations by 49.55% on the average.

Інформація для авторів журналу «Доповіді Національної академії наук України»

Редакція журналу приймає для публікації повідомлення, що мають *мотивоване представлення* дійсного члена або члена-кореспондента НАН України з відповідної спеціальності. До статті додається супровідний лист організації, в якій виконано дослідження.

Журнал друкує не більше *трьох повідомлень одного автора* на рік. Повідомлення дійсних членів та членів-кореспондентів НАН України друкуються без обмежень.

У разі додаткового рецензування та переробки статті датою надходження вважається дата одержання редакцією її остаточного тексту. Прохання редакції про переробку не означає, що стаття прийнята до друку; після переробки вона знову розглядається редколегією. При відмові в публікації роботи редколегія залишає за собою право не повертати автору один екземпляр статті.

Повідомлення публікуються українською *або* російською мовою. Автор зазначає рубрику, в якій має публікуватися повідомлення, індекс за Універсальною десятиковою класифікацією; в кінці повідомлення наводить повну назву організації, де виконане дослідження, свою поштову і *електронну* адресу та номер телефону. Кожний примірник повідомлення має бути підписаний автором.

Обсяг повідомлення не повинен перевищувати *шести сторінок журналу* (включаючи список літератури — до 15 поз., таблиці, рисунки — до 4).

Фізичні величини наводяться в одиницях СІ. Наукова термінологія повинна відповідати «Російсько-українському словнику наукової термінології» (Київ: Наук. думка. — Т. 1–3. — 1994, 1996, 1998).

Резюме українською, російською та англійською мовами *подаються на окремій сторінці* (обов'язково вказати написання прізвищ та назву статті трьома мовами).

Рукопис та рисунки (*на окремій сторінці*) слід надсилати у *двох* екземплярах. Текст має бути підготовлений методом комп'ютерного набору та роздрукований на білому папері через 1,5 інтервала на одній стороні аркуша, розмір шрифту 14 пт.

Електронну версію статті автор надсилає на вимогу редакції безпосередньо при підготовці відповідного номеру журналу до друку (термін узгоджується в редакції). Файл статті подається у форматі **ІАТ_ЕX2_ε** та з результатом трансляції у dvi- чи pdf-файл. **Текст у файлі повинен точно відповідати надрукованому тексту.** Рисунки потрібно записувати окремими файлами у вихідному форматі та у форматі .eps. Для імен файлів використовувати зрозумілі короткі назви, набрані *латинськими* літерами (для статті — прізвище першого автора, для рисунків — rys1, rys2 і т.д.). Статті, що не містять математичних формул, можна подавати в форматі **Word**.

Список літератури складається в порядку посилання в тексті; оформлення літературних джерел повинно відповідати вимогам журналу (див. списки літератури в останніх номерах журналу).

Коректура статей авторам не надсилається.

Адреса редакції: Україна, 01601, Київ, вул. Терещенківська, 3, тел. (044) 235-12-16

Автор може передплатити номер журналу, в якому надруковано його статтю, у відділенні зв'язку «Укрпошти» (індекс 74137), а також у агенції «Укрінформнаука» (e-mail: innovation@nas.gov.ua; тел./факс: +38(044)239-64-57).